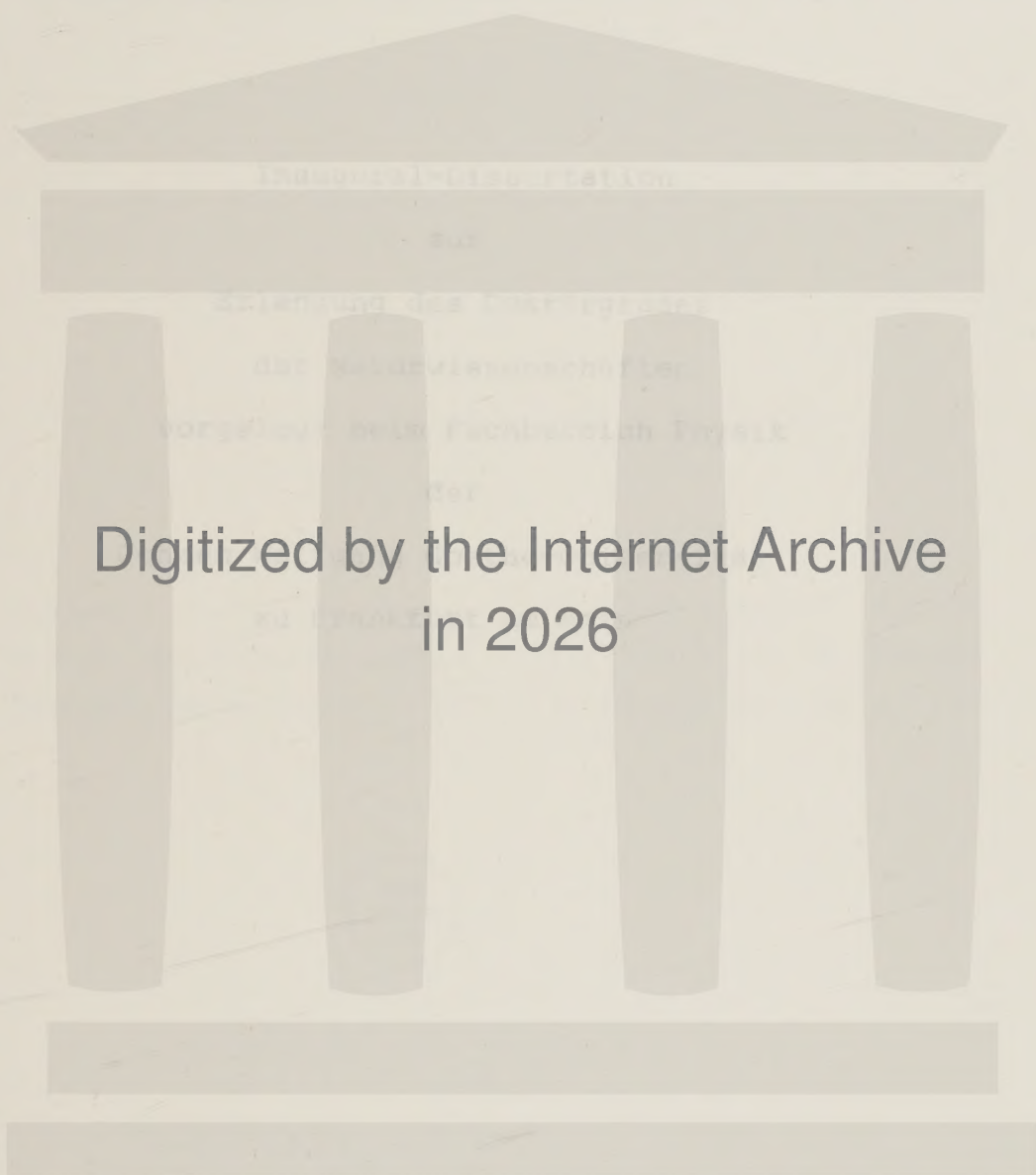


1975

H. Wiesner.

Frankfurt 9/11. 1975

FLÜGELPRAKTIKUMSWEISEN AN DER DISPLAZIERTEN
VON STRUKTURELLEN PHASISBEREICHEN



Digitized by the Internet Archive
in 2026

TIEFTEMPERATURENTWICKLUNG AN DER DISPLAZIVEN GRENZE
VON STRUKTURELLEN PHASENÜBERGÄNGEN

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik
der
Johann Wolfgang Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

von
Hartmut Wiesner
aus Frankfurt (Oder)

Frankfurt am Main

Mai 1975

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der
Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt/Main

Dekan:	Professor Dr. W. Pohlitz
Erster Berichterstatter:	Professor Dr. H. Thomas
Zweiter Berichterstatter:	Professor Dr. R.J. Jelitto

Tag der mündlichen Prüfung: 30.6.1975

Inhaltsverzeichnis

=====

	Seite
1. Einleitung	1
2. Klassischer Kristall bei $T = 0$	6
3. Die Phononen-Greensfunktion	13
3.1 Paradiestortive Phase	13
3.2 Ferrodistoritive Phase	26
3.3 Hartree-Näherung	31
4. Tieftemperaturentwicklung	33
4.1 Tieftemperaturentwicklung in erster Ordnung	34
4.2 Tieftemperaturentwicklung in zweiter Ordnung	41
4.3 Tieftemperaturentwicklung für $n \geq 3$	48
4.4 Diskussion der Resultate	54
4.5 Tieftemperaturentwicklung und Skalenhypothese	58
5. Zusammenfassung	60
Anhang A : Die führenden Selbstenergie- anteile	61
Anhang B : Cumulantenentwicklung	63
Literaturverzeichnis	66

1. Einleitung

Eine große Zahl von experimentellen und theoretischen Untersuchungen wurden in den letzten Jahrzehnten auf dem Gebiet der strukturellen oder auch distortiven Phasenübergänge durchgeführt. Dabei standen zunächst die für technische Anwendungen besonders interessanten ferroelektrischen Phasenübergänge im Vordergrund. Die ferroelektrischen Phasenübergänge gehören zur Gruppe der ferrodistorativen Phasenübergänge. Sie zeichnen sich durch ein makroskopisches Dipolmoment aus, das unterhalb einer bestimmten Temperatur selbst bei Abwesenheit eines äußeren elektrischen Feldes nicht verschwindet. Oberhalb von T_C verschwindet das Dipolmoment.

Die phänomenologischen Theorien zur Erklärung der Ferroelektrizität fanden mit der Arbeit von Devonshire (1) einen gewissen Abschluß. Devonshire entwickelt die Freie Energie $F(T,P,S)$ nach der Polarisierung P und der Spannung S . Seine Theorie, die er insbesondere auf das Bariumtitanat BaTiO_3 anwendet, ist ein Spezialfall der Landau'schen Theorie der Phasenübergänge (2,3), wenn die Polarisierung als Ordnungsparameter aufgefaßt wird. Devonshires Ergebnisse für die Dielektrizitätskonstante stimmen recht gut mit den Messungen von Merz (4) überein.

Der wesentliche Schritt von den phänomenologischen zu den mikroskopischen Theorien gelang Cochran (5,6) mit seiner gitterdynamischen Theorie der ferroelektrischen Phasenübergänge. Er konnte den ferroelektrischen Phasenübergang als Folge eines instabilen Schwingungszustandes im Kristall erklären. Cochran erhielt für die Temperaturabhängigkeit eines transversalen optischen Modes

$$\omega_{OT}^2 \sim (T - T_C).$$

Dieses Konzept des "Soft Modes" erwies sich in der Folge als ein allgemeines Konzept zur Untersuchung der strukturellen Phasenübergänge, das auch bei nicht-ferroelektrischen strukturellen Phasenübergängen benutzt werden kann.

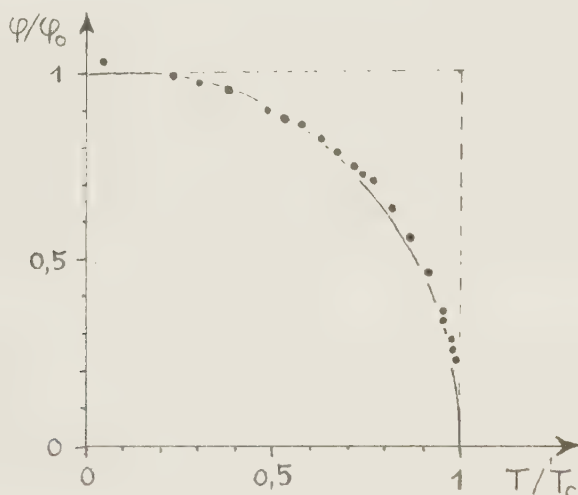
So konnten sowohl die Phasenübergänge beim KDP-Kristall als auch bei den Kristallen vom Perovskit-Typ mit dem Soft-Mode-Konzept erklärt werden. Strukturelle Phasenübergänge, wie sie z.B. beim KDP (KH_2PO_4) auftreten, werden Phasenübergänge vom Ordnungs-Unordnungstyp genannt. Beim KDP ordnen sich in der Tieftemperaturphase die Protonen zwischen den PO_4 -Tetraedern in eine der beiden Lagen, die sie in der Hochtemperaturphase haben.

Die spontane Polarisierung des KDP erklärt Slater (7) mit der Verschiebung der Wasserstoffionen längs der Verbindungslinie zwischen zwei PO_4 -Tetraedern. Er nahm an, daß das Potential für die H-Ionen längs dieser Linie zwei Minima hat und das Dipolmoment aus der Ordnung der H-Ionen folgt. Neutronenstreuexperimente von Bacon und Pease (8) bestätigten diese Annahme. Das makroskopische Dipolmoment resultiert allerdings nicht allein aus der Verschiebung der Protonen, sondern vor allem aus der dadurch induzierten Verschiebung der Kalium- und Phosphorionen. (Genauer betrachtet, stellt das KDP einen Mischfall von antiferroelektrischem und ferroelektrischem Übergang dar.)

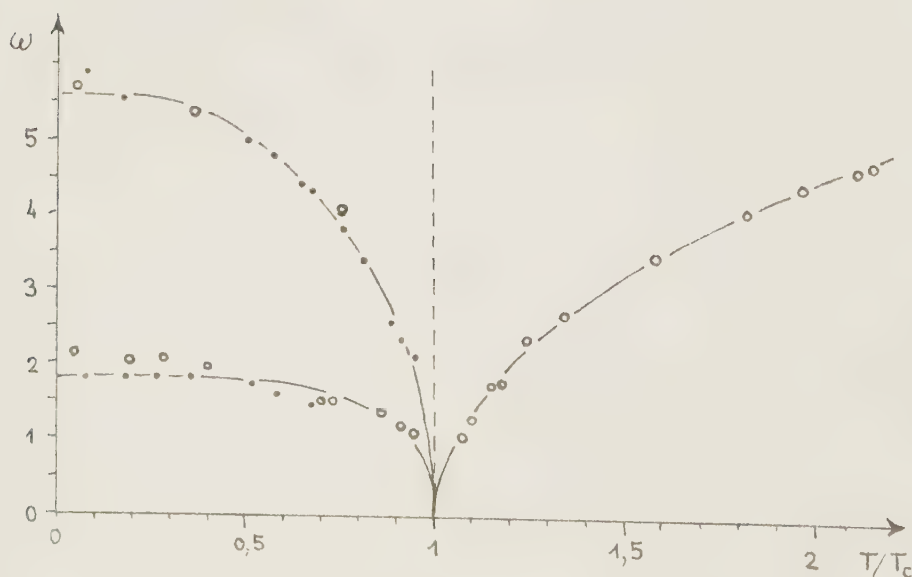
Blin (9) und De Gennes (10) verfeinerten das Slater'sche Modell. Dem Soft Mode entspricht der Tunnelmode zwischen den beiden Potentialminima. De Gennes Pseudo-Spin-Formalismus wurde in einer Reihe folgender Arbeiten erweitert (11-15).

Die zweite Gruppe der strukturellen Phasenübergänge sind die displaziven Phasenübergänge. Hierbei wird beim Übergang von der Hochtemperatur- zur Tieftemperaturphase durch eine Verzerrung des Untergitters die Kristallsymmetrie erniedrigt. Vertreter dieser Gruppe sind die Kristalle vom Perovskit - Typ.

Die Kristalle vom Perovskit - Typ (z.B. BaTiO_3 , SrTiO_3 , KMnF_3 , LaAlO_3) sind instabil gegen eine bestimmte Gitterschwingung. Die Abbildungen zeigen die Temperaturabhängigkeit des Drehwinkels des Sauerstoffoktaeders und des q_R -Modes beim SrTiO_3 .



Drehwinkel des Sauerstoffoktaeders als Funktion der reduzierten Temperatur. EPR-Messung von Müller et.al. (18)



Soft-Mode in Abhängigkeit von der reduzierten Temperatur.
Raman -Streuung: Fleury et.al. (16)
Neutronen-Streuung: Shirane und Yamada (17) o--o--

Mithilfe von Molekularfeldnäherungen konnte in den Arbeiten von Thomas und Müller (19) und von Pytte und Feder (20) der displazive Phasenübergang beschrieben werden.

Einige weitere Arbeiten, die sich mit der Untersuchung struktureller Phasenübergänge beschäftigen, sind Thomas (21), Pytte (22), Gillis und Koehler (23,24), Eisenriegler (25) und Sokolov (26). Insbesondere stand bei den Arbeiten (22) - (26) die Frage im Vordergrund, ob die Molekularfeldnäherung oder die "self-consistent Phonon Approximation" als die dem Problem adäquatere Näherung anzusehen ist. Ausgehend von der Universalitätshypothese (s. Kadannoff (27)) wurde in den Jahren nach 1971 ein neuer Zugang zu dem Gebiet der kritischen Erscheinungen entwickelt, die Methode der Renormierungsgruppe (Übersichtsartikel: Shang-keng Ma (28), Wilson und Kogut (29)).

Hierbei werden im kritischen Bereich sukzessiv effektive Hamilton-Operatoren konstruiert, bei denen jeweils über einen gewissen Teil der Freiheitsgrade gemittelt wird. Diese Transformationen τ werden solange angewendet, bis ein Hamiltonoperator H entstanden ist, der die Fixpunktgleichung

$$\tau(H^*) = H$$

erfüllt. Aus dem Verhalten der Parameter des Hamilton-Operators unter den Transformationen in der Nähe des Fixpunktes erhält man das Verhalten der kritischen Größen in der Umgebung des kritischen Punktes und damit den Wert der kritischen Exponenten.

Zur Zeit sind die mathematischen Schwierigkeiten noch sehr groß, so daß die Lösung nur für Sonderfälle gelang ((30) - (31)).

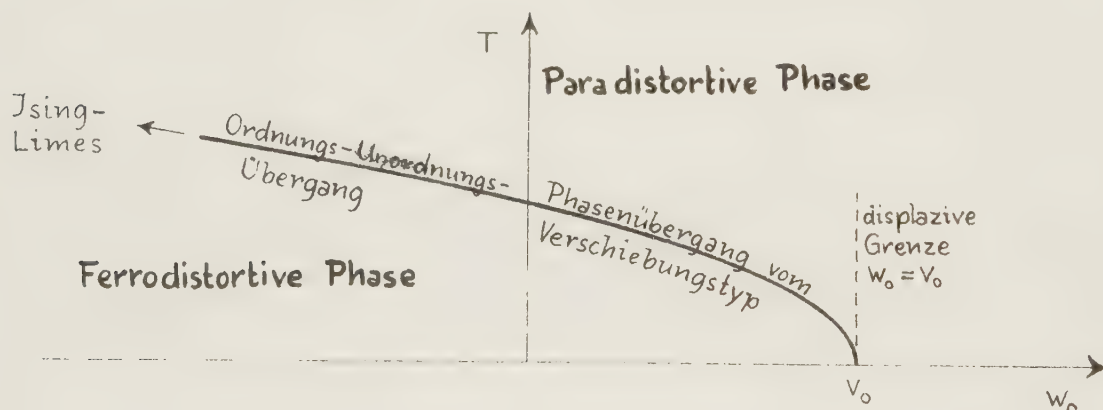
Übersicht über die Arbeit

In dieser Arbeit wird der Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2} \sum_i p_i^2 + \frac{w_0}{2} \sum_i x_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} x_i x_j + \frac{\gamma}{4!} \sum_i x_i^4 \quad (1.1)$$

für den Bereich kleiner Temperaturen diskutiert.

Die Konstante γ des anharmonischen Anteils ist positiv vorausgesetzt. Wir bezeichnen die $q = 0$ - Fourierkomponente der Wechselwirkung mit v_0 . Dann ist für $w_0 > v_0$ kein Phasenübergang möglich, für $0 \leq w_0 < v_0$ ist ein Phasenübergang vom Verschiebungstyp möglich. Ist $w_0 < 0$, dann hat das Potential zwei Minima, und aufgrund der Wechselwirkung ist ein Phasenübergang vom Ordnungs-Unordnungstyp möglich, wie er beim KDP auftritt. In der Abbildung ist die Phasenkurve schematisch dargestellt.



In Abschnitt 2 wird für den klassischen Kristall bei $T = 0$ das kritische Verhalten in Abhängigkeit von $(w_0 - v_0)$ diskutiert. Dies ist bei $T = 0$ exakt möglich. Davon ausgehend werden wir im Abschnitt 3 die Gleichung für die Greenschen Funktionen herleiten und mit deren Hilfe in Abschnitt 4 die Tieftemperaturentwicklung für den klassischen Kristall angeben. In der Grenze $T \rightarrow 0$ geht diese in die exakte $T = 0$ - Lösung über.

Die Wilson'sche Theorie der Renormierungsgruppe bestimmt die kritischen Größen (Suszeptibilität etc.) für einen Bereich um die Phasenlinie. In dem Bereich sehr kleiner Temperaturen sollten die Ergebnisse der Tieftemperaturentwicklung mit denen der Wilson'schen Theorie übereinstimmen.

Cowley und Bruce (30) untersuchen z.B. einen strukturellen Phasenübergang mithilfe einer Entwicklung nach dem Parameter $\epsilon = 4 - d$ (d = Dimension).

Im Rahmen unseres Modells können wir die Arbeit von Cowley und Bruce folgendermaßen beschreiben: Es wird ein festes $w_0 < v_0$ gewählt (die restlichen Modellparameter werden als unveränderlich vorausgesetzt). Dann gibt es genau ein T_C . Um dieses $T_C(w_0, v_0)$ wird nach dem Parameter $\epsilon = 4 - d$ entwickelt.

In der vorliegenden Arbeit soll der Versuch unternommen werden, das kritische Verhalten an der displaziven Grenze, die durch $v_0 = w_0$ und $T = 0$ gegeben ist, durch eine Tieftemperaturentwicklung zu untersuchen. Hierbei ist die Dimension $\bar{d}$ fest gewählt, und die Koeffizienten in der Entwicklung nach Potenzen von T hängen von w_0 und v_0 ab. Daß wir die displazive Grenze als denjenigen Punkt wählen, um den wir die Tieftemperaturentwicklung ausführen, hat seinen Grund eben darin, daß für den klassischen Fall das kritische Verhalten bei $T = 0$ exakt untersucht werden kann und der kritische Punkt für $T = 0$ genau bei $v_0 = w_0$ liegt.

Klassischer Kristall bei $T = 0$

Wir betrachten einen Kristall mit N Einheitszellen. Zur Vereinfachung des Problems nehmen wir an, daß die Bewegung derjenigen Koordinaten x_i , die für den Phasenübergang relevant sind, mit einem Freiheitsgrad pro Einheitszelle beschreibbar ist. Die x_i können die Auslenkung der Ionen eines Untergitters aus einer Ruhelage in einer ausgezeichneten Richtung (siehe z.B. (25)) sein, die Drehung des i -ten Ions um eine Achse beschreiben u.ä. Formal heißt dies, daß wir "lokale Normalkoordinaten" (21) einführen und den $3kN$ -dimensionalen Vektorraum (N Einheitszellen, k Ionen pro Einheitszelle) auf den N -dimensionalen, für den Phasenübergang relevanten Unterraum projizieren. Der Rest wird als Wärmebad angesehen.

Für unsere Betrachtungen des klassischen Kristalls legen wir die den Hamilton-Operator (1.1) entsprechende Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (p_i^2 + w_0 x_i^2 + \frac{\gamma}{12} x_i^4) - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_{ij} x_i x_j \quad (2.1)$$

zugrunde. Die Terme in der ersten Summe stellen die kinetische Energie (in der Arbeit ist stets $m_i = 1$ gewählt) und das Potential für die Einzelkoordinate dar, das aus der Wechselwirkung mit den ansonsten nicht weiter berücksichtigten Ionen herrührt. Dieses Potential besteht aus einem harmonischen und einem anharmonischen Anteil. Die p_i sind die zu den Koordinaten konjugierten Impulse. Die zweite Summe stellt die bilineare Wechselwirkung zwischen den Koordinaten x_i dar.

Die Referenzkonfiguration, von der aus die Auslenkung x_i gemessen wird, wird so gewählt, daß der Erwartungswert $\langle x_i \rangle = 0$ ist in der Hochtemperaturphase.

Wirken keine äußeren, zeitabhängigen Felder auf die Koordinaten x_i , dann sind diese bei $T = 0$ im klassischen Kristall in der Gleichgewichtslage fixiert. Die Gleichgewichtslage ist definiert als diejenige Konfiguration, in der die potentielle Energie ihr absolutes Minimum annimmt (bei $T = 0$ ist die Freie Energie gleich der inneren Energie; der kinetische Anteil der Hamiltonfunktion entfällt beim absoluten Nullpunkt).

Wir führen jetzt noch kollektive Normalkoordinaten $Q_{\vec{q}}$ ein:

$$Q_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N x_i e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_i} \quad (2.2)$$

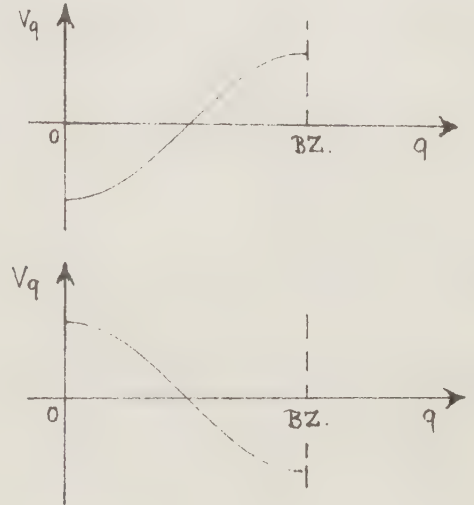
und die Fouriertransformierte der Wechselwirkung

$$v_{\vec{q}} = \sum_j v_{ij} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_j)} \quad (2.3)$$

Die $\vec{R}_i$ sind die Gittervektoren, die $\vec{q}$ die Wellenvektoren. Die Vektorzeichen werden wir im folgenden der Einfachheit halber weglassen, wenn Mißverständnisse ausgeschlossen sind.

Die Normalkoordinate Q_0 hat die anschauliche Bedeutung einer Verschiebung des gesamten Untergitters in der möglichen Bewegungsrichtung der x_i um den Betrag $Q_0/\sqrt{N}$. Der Erwartungswert der Normalkoordinate Q_0 ist der Ordnungsparameter unseres Modells.

Die Wechselwirkung v_q bestimmt die Art des Phasenüberganges. Nimmt v_q das Maximum am Rand der Brillouinzone an, dann erhalten wir einen antiferrodistortiven Phasenübergang. Hat die Wechselwirkung v_q das Maximum bei $q = 0$, dann ist ein ferrodistorativer Phasenübergang möglich. In dieser Arbeit untersuchen wir nur den Fall eines ferrodistorativen Phasenübergangs. Wir setzen also im folgenden stets voraus, daß v_q das Maximum bei $q = 0$ annimmt.

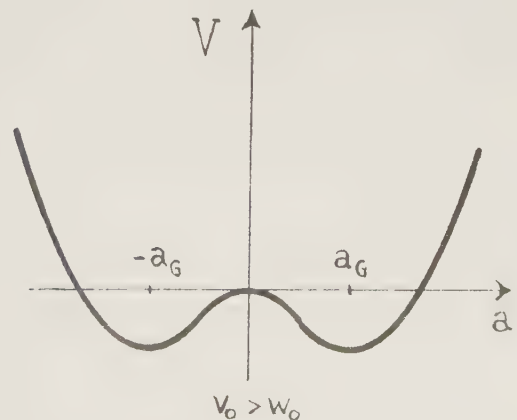
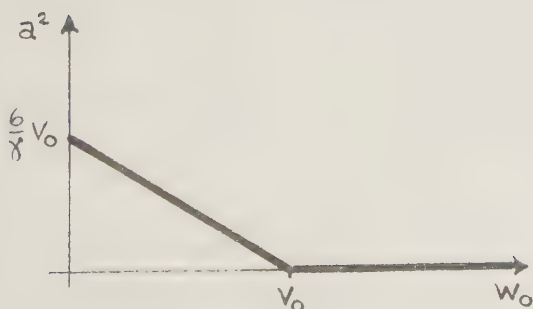
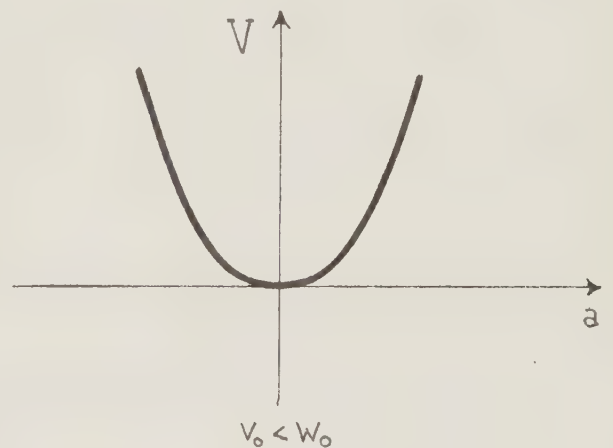


Wir wollen jetzt zeigen, daß mit dieser Voraussetzung die potentielle Energie V des Kristalls ihr absolutes Minimum dann annimmt, wenn alle Koordinaten um den gleichen Betrag a in positiver oder alle um a in negativer Richtung verschoben werden. Für eine solche Verschiebung hat V die Form

$$V(a) = N \left(\frac{w_0}{2} a^2 - \frac{v_0}{2} a^2 + \frac{\gamma}{24} a^4 \right) \quad (2.4)$$

Ist $w_0 > v_0$, dann besitzt $V(a)$ genau ein Minimum, das bei $a = 0$ liegt. Für $w_0 < v_0$ hat $V(a)$ zwei gleichtiefe Minima bei den Werten

$$a = \pm \sqrt{\frac{6}{\gamma} (v_0 - w_0)} \quad (2.5)$$



Zur Abkürzung führen wir den Parameter

$$p = w_0 - v_0$$

ein. Die Gleichgewichtswerte der Koordinaten sind $\pm a_G$, wobei

$$a_G = \begin{cases} \sqrt{\frac{6}{r}} |p| & \text{für } p < 0 \\ 0 & \text{für } p > 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

Der Ordnungsparameter wächst in der geordneten Phase wie $|p|^{1/2}$.

Bei $v_0 = w_0$ liegt also ein kontinuierlicher Phasenübergang vor. Für $v_0 < w_0$ ist der Grundzustand symmetrisch. (H ist invariant unter der Inversion $x \rightarrow -x$) Für $v_0 > w_0$ ist die Symmetrie gebrochen.

Wir müssen noch zeigen, daß für jede andere, beliebige Verschiebung

$$x_i = a_G + y_i, \quad i = 1, \dots, N$$

gilt:

$$V(x_i) - V(a_G) \geq 0$$

Unter Benutzung des Wertes von a_G erhalten wir

$$V(x_i) - V(a_G) = \frac{1}{2} \sum_q (v_0 - v_q) |y_q|^2 + \sum_i y_i^2 (y_i + 2a_G)^2 \frac{r}{24}$$

(y_q ist die Fouriertransformierte zu y_i)

Da nach Voraussetzung $v_0 > v_q$ für $q \neq 0$ gilt, ist

$$V(x_i) \geq V(a_G)$$

Das Gleichheitszeichen gilt nur für $y_i = -2a_G$. Damit ist gezeigt, daß eine Konfiguration, bei der alle Koordinaten x_i den Wert $+a_G$ oder alle den Wert $-a_G$ haben, die niedrigste Energie hat und damit den (zweifach entarteten) Grundzustand darstellt.

An den Koordinaten greife jetzt ein homogenes Feld F an. Zur Hamiltonfunktion H müssen wir dann den Term

$$- F \sum_{i=1}^N x_i$$

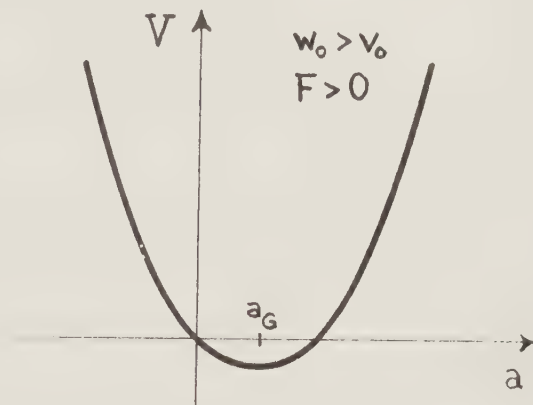
addieren.

Nehmen wir wie im feldfreien Fall zunächst an, daß eine homogene Verschiebung aller Koordinaten um den Betrag a die potentielle Energie minimiert.

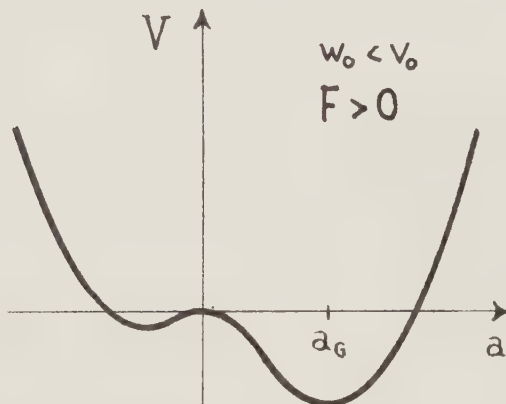
V ist dann

$$V(a) = N \frac{w_0^2}{2} a^2 - \frac{v_0^2}{2} a^2 + \frac{\gamma}{24} a^4 - aF \quad (2.7)$$

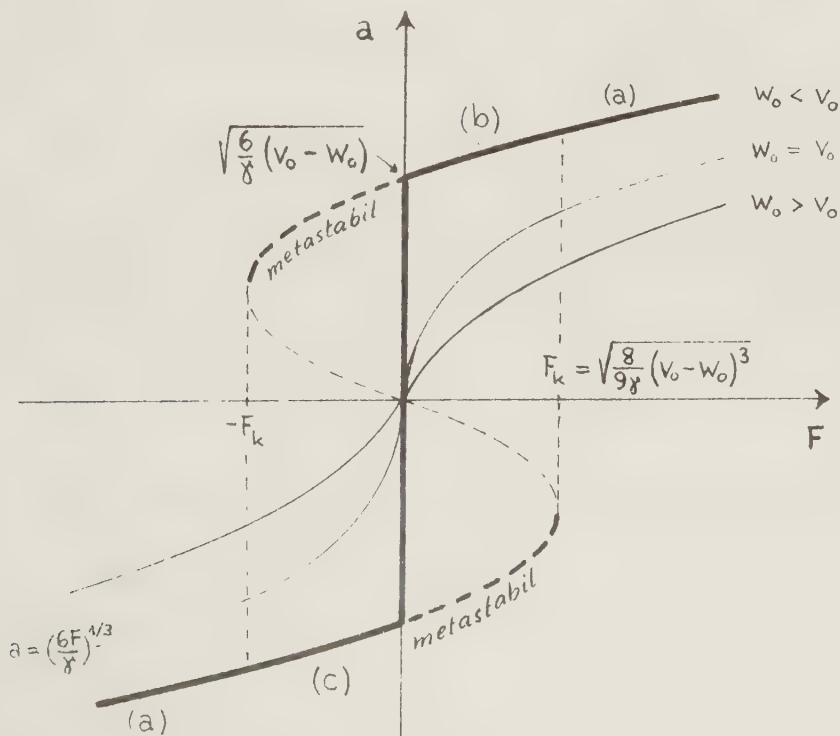
Für $w_0 \geq v_0$ hat $V(a)$ genau ein Minimum.



Ist $w_0 < v_0$, dann hat $V(a)$ zwei Minima. Dem stabilen Gleichgewichtszustand entspricht derjenige Wert von a , für den $V(a)$ das absolute Minimum annimmt.



In der Abbildung ist $a_G(F)$ skizziert.



Die metastabilen Zustände erhalten wir, indem wir den Definitionsbereich des Lösungszweiges (b) erweitern bis $F_k = -\sqrt{\frac{8}{9\gamma}} (v_0 - w_0)^3$. Entsprechend wird der Gültigkeitsbereich des Zweiges (c) ausgedehnt bis $F_k = \sqrt{\frac{8}{9\gamma}} (v_0 - w_0)^3$. $a(F)$ wird also bei $w_0 < v_0$ durch eine Hysteresekurve beschrieben.

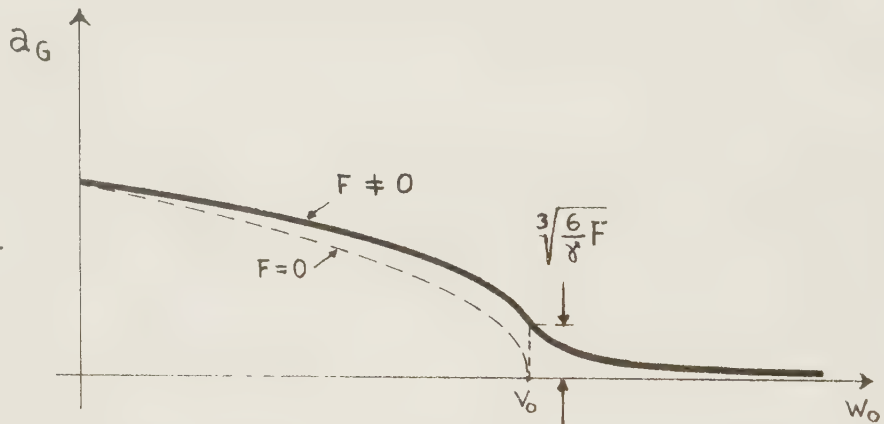
Die folgenden Betrachtungen beziehen sich nur noch auf den stabilen Gleichgewichtszustand.

An der Stelle $F = 0$ springt $a(F)$ um den Wert $2\sqrt{\frac{6}{\gamma}}(v_0 - w_0)$. Für $F \neq 0$ gilt $a_G^2 > 0$, d.h. es gibt keinen Phasenübergang.

An der Stelle $w_0 = v_0$ erhalten wir für a den Wert

$$a_G = \sqrt[3]{\frac{6}{\gamma} F} \quad (2.9)$$

An der displaziven Grenze wächst also der Ordnungsparameter mit dem angelegten Feld wie $F^{1/3}$.



Ähnlich wie im feldfreien Fall kann gezeigt werden, daß im stabilen Gleichgewichtszustand für eine beliebige Verschiebung

$$x_i = a_G + y_i$$

gilt

$$V(x_i) - V(a_G) \geq 0.$$

Ist $F \neq 0$, dann ist die echte Ungleichung erfüllt.

Um das dynamische Verhalten zu studieren, lassen wir nun auf die i -te Koordinate eine Kraft $F_i(t)$ wirken, die aus einem homogenen Anteil F und einem "kleinen" harmonischen Anteil $\delta f_i(t) = \delta f_i e^{-i\omega t}$ besteht.

$$F_i(t) = F + \delta f_i e^{-i\omega t} \quad (2.9)$$

Mithilfe des Ansatzes $x(t) = a_G + \delta x e^{-i\omega t}$ erhalten wir die linearisierte Bewegungsgleichung für δx_i

$$-\omega^2 \delta x_i = w_0 \delta x_i - \sum_{j \neq i} v_{ij} \delta x_j + \frac{\gamma}{2} a_G^2 \delta x_i - \delta f_i \quad (2.10)$$

Wir gehen über zu kollektiven Koordinaten und lösen nach δQ_q auf:

$$\delta Q_q = \frac{1}{-\omega^2 + \omega_0^2 - v_q + \frac{1}{2}a_G^2} \delta f_q \quad (2.11)$$

Die lineare Antwortfunktion ist damit

$$\chi_q(\omega, F) = \frac{1}{\omega_q^2 - \omega^2} \quad (2.12)$$

mit

$$\omega_q^2 = p + \frac{1}{2}a_G^2 + (v_0 - v_q) \quad (2.13)$$

Für $F = 0$ erhalten wir mit (2.6) für die statische Suszeptibilität und die Resonanzfrequenz

$$\chi_{q(0)}^{-1} = \omega_q^2 = \begin{cases} p + (v_0 - v_q) & \text{für } p > 0 \\ -2p + (v_0 - v_q) & \text{für } p < 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

Bei den folgenden Rechnungen werden wir stets für die Dispersion der harmonischen Frequenz die Debye-Näherung

$$\omega_q^2 = p + \frac{\alpha}{2}q^2 \quad \text{für } 0 \leq q \leq q_D$$

benutzen. q_D ist die Debye-Wellenzahl und α die Krümmung von ω_q^2 bei $q = 0$. Wir wählen das Volumen der Einheitszelle gleich 1.

$$\text{Dann ist } q_D = \sqrt[3]{6\pi^2}.$$

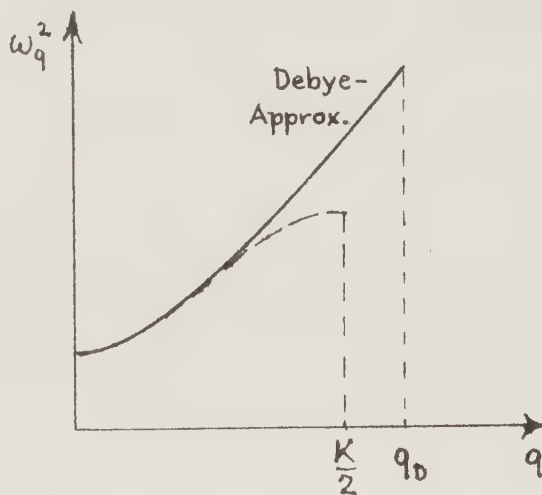
Für Nächste-Nachbarwechselwirkung ist

$$v_q = 2v(\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z)$$

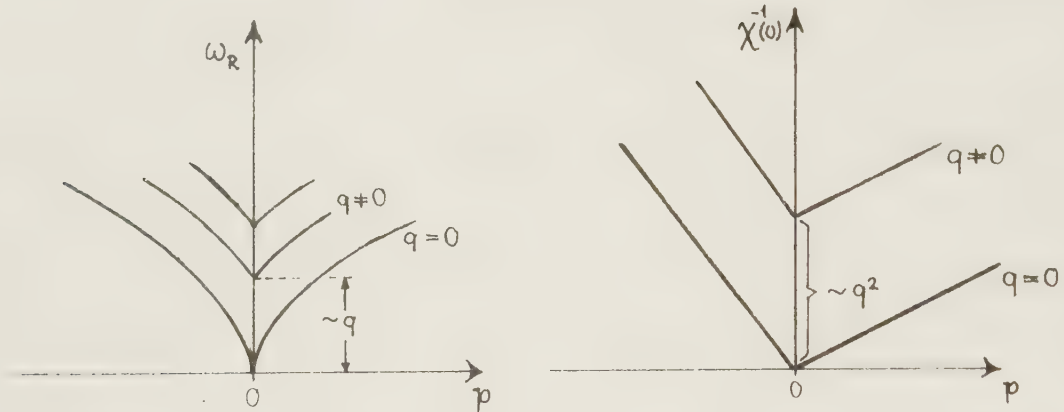
mit v als Wechselwirkungskonstante.

Entwickeln und Vergleich mit der obigen Darstellung gibt

$$\omega_q^2 = p + \frac{v_0}{6} q^2$$



In den Abbildungen sind $\chi_q^{-1}(0) = \omega_q^2$ und ω_q skizziert. Für $q = 0$ zeigt ω_0 ein Soft-Mode-Verhalten.

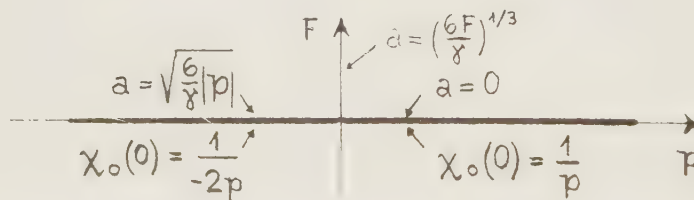


Ist $F \neq 0$, dann gilt stets

$$\chi_q^{-1}(0, F) > 0$$

Wir sehen - wie bei der Diskussion des Ordnungsparameters - , daß bei endlichem äußerem Feld F kein Phasenübergang möglich ist. Die Resonanzfrequenz ω_q ist für $F \neq 0$ stets größer Null.

In der folgenden Abbildung sind abschließend diejenigen Ergebnisse dargestellt, die wir als Ausgangspunkt für die Tieftemperaturentwicklung nehmen.



3. Die Phononen - Greensfunktion

Um unser Ziel, eine Tieftemperaturentwicklung für die inverse statische Suszeptibilität, den Soft Mode ω_s und den Ordnungsparameter a im klassischen Kristall, zu erreichen, gehen wir einen Umweg. Mit dem Formalismus der Greenschen Funktionen liegt eine ausgearbeitete Technik vor, die wir an unsere Fragestellung anpassen können. Wir werden eine quantenmechanische Entwicklung aufstellen und dann zum klassischen Fall übergehen.

Wir betrachten im folgenden den Hamilton-Operator (1.1). Die paradistortive oder Hochtemperatur-Phase ist bei unserer Wahl der Koordinaten x_i dadurch definiert, daß für jede Koordinate der Erwartungswert verschwindet.

$$\langle x_i \rangle = 0 \quad (3.1)$$

In der Tieftemperaturphase (ferrodistortive Phase) gilt für alle Koordinaten

$$\langle x_i \rangle = x_0 \quad (3.2)$$

d.h. alle Koordinatenruhepunkte verschoben sich um den gleichen Betrag x_0 in dieselbe Richtung.

Ein antiferrodistortiver Kristall würde in der Tieftemperaturphase durch

$$\langle x_i \rangle = x_0 \exp(i \frac{K}{2} R_i) \quad (3.3)$$

beschrieben werden.

K ist hierbei ein reziproker Gittervektor und R_i der Gittervektor zum i -ten Gitterplatz.

3.1 Paradistortive Phase

Da die Erwartungswerte der lokalen Koordinaten x_i verschwinden (3.1), verschwinden auch die Erwartungswerte der kollektiven Koordinaten Q_q (2.2):

$$\langle Q_q \rangle = 0 \text{ für jedes } q \quad (3.4)$$

Aus (2.2) folgt als inverse Fouriertransformation

$$x_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqR_i} Q_q \quad (3.5)$$

Setzen wir (3.5) in den Hamilton-Operator (1.1) ein, dann erhalten wir unter Benutzung der Definition für die Fouriertransformierte Wechselwirkung (2.3) den Hamilton-Operator in kollektiven Koordinaten.

$$H = \frac{1}{2} \sum_q \left[\dot{Q}_q \dot{Q}_{-q} + \omega_q^2 Q_q Q_{-q} \right] + \frac{1}{4!} \sum_{q_1, q_2, q_3, q_4} U_{q_1, q_2, q_3, q_4}^{(4)} Q_{q_1} Q_{q_2} Q_{q_3} Q_{q_4} \quad (3.6)$$

Hierbei sind

$$\omega_q^2 = \omega_0^2 - v_q \quad (3.7)$$

$$U_{q_1, q_2, q_3, q_4}^{(4)} = \frac{\delta}{N} \sum_K \delta_{q_1 + q_2 + q_3 + q_4, K} \quad (3.8)$$

Im folgenden nehmen wir an, daß die Operatoren $Q_q(t)$ in der Heisenbergdarstellung gegeben sind.

Die Bewegungsgleichung für die Koordinaten Q_q erhält man aus (3.6) mithilfe von

$$\ddot{Q}_q(t) = \frac{i}{\hbar} [H, \dot{Q}_q] \quad (3.9)$$

und

$$[\dot{Q}_q, Q_{q'}] = \frac{\hbar}{i} \delta_{q, -q'} \quad (3.10)$$

Es ergibt sich

$$\ddot{Q}_q(t) = -\omega_q^2 Q_q(t) - \frac{1}{3!} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{-q, q_1, q_2, q_3}^{(4)} Q_{q_1}(t) Q_{q_2}(t) Q_{q_3}(t) \quad (3.11)$$

Diese Gleichung läßt sich wegen der Anharmonizitäten nur noch approximativ lösen. Deshalb entwickeln wir jetzt den auf unser Problem zugeschnittenen Formalismus der Green'schen Funktion. Aus den Green'schen Funktionen lassen sich durch analytische Fortsetzung die Suszeptibilität und daraus das Phononenspektrum angeben.

Wir benutzen dabei den Formalismus von Kwok und Miller (32).

Im thermischen Gleichgewicht ist der statistische Mittelwert irgendeines quantenmechanischen Operators A gegeben durch

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta H} A) / \text{Tr}(e^{-\beta H}) \quad (3.12)$$

H ist der Hamilton-Operator (1.1).

Entsprechend definieren wir die Korrelationsfunktion D^K zweier Normalkoordinaten im Heisenbergbild durch

$$D_{qq'}^K(t, t') = \frac{i}{\hbar} \langle Q_q(t) Q_{q'}(t') \rangle \quad (3.13)$$

Die imaginäre Einheit wird aus Zweckmäßigkeit für spätere Rechnungen in die Definition mit einbezogen.

Aus der Invarianz der Spur gegen zyklische Vertauschung folgt, daß D^K nur von der Differenz $t - t'$ abhängt. Weiterhin ergibt sich aus der Translationsvarianz des Kristallgitters, daß $q = -q'$ ist, also

$$D_{q,q'}^K(t,t') = D_{q,-q}^K(t-t') \delta_{q,-q'} \quad (3.14)$$

Zur Vereinfachung schreiben wir im folgenden $D_q^K(t-t')$.

Für die weiteren Rechnungen benötigen wir die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion, die wir wie folgt definieren:

$$D_q^K(\omega) = \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} D_q^K(t-t') e^{i\omega(t-t')} dt \quad (3.15)$$

$$D_q^K(t-t') = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} D_q^K(\omega) e^{-i\omega(t-t')} \quad (3.16)$$

Jetzt wollen wir noch eine wichtige Eigenschaft der Korrelationsfunktion anführen. Aus der Invarianz der Spur gegen zyklische Vertauschung folgt leicht die Gleichung

$$D_q^K(t-t') = D_{-q}^K(t'-t-i\beta\hbar) \quad (3.17)$$

bzw. für die Fouriertransformierte

$$D_q^K(\omega) = D_{-q}^K(-\omega) e^{\beta\hbar\omega} \quad (3.18)$$

Als nächstes werden wir einen Zusammenhang herstellen zwischen den Korrelationsfunktionen und der linearen Antwortfunktion $\chi_{qq'}(t,t')$.

Dazu lassen wir eine "kleine" Kraft auf die "Ionen" wirken:

$$H_{st} = - \sum x_i(t) F_i(t) \quad (3.19)$$

Durch diese Störung verschwinden die Erwartungswerte $\langle x_i \rangle$ der lokalen Koordinaten nicht mehr. Nach der Theorie der linearen Antwort (33) ist die Abweichung $\langle x_i \rangle_{st}$ vom Erwartungswert eines Operators x_i ohne Störung gegeben durch den Ausdruck

$$\langle x_i \rangle_{st} = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t-t') \langle [x_i(t), x_j(t')] \rangle F_j(t') \quad (3.20)$$

Die Sprungfunktion $\theta(t-t')$ ist definiert als

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{für } t > t' \\ 0 & \text{für } t < t' \end{cases} \quad (3.21)$$

Transformieren wir (3.20) auf Normalkoordinaten, so erhalten wir

$$\langle Q_q(t) \rangle_{st} = \sum_{q'} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{q,q'}(t,t') F_{q'}(t') \quad (3.22)$$

Hierbei ist

$$F_q(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-iqR_i} F_i(t)$$

und

$$\chi_{q,q'}(t,t') = \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle [Q_q(t), Q_{q'}(t')] \rangle \quad (3.23)$$

$\chi_{qq'}(t,t')$ wird lineare Antwortfunktion genannt.

In (3.23) können wir die Korrelationsfunktion (3.13) einsetzen und erhalten

$$\chi_{q,q'}(t,t') = \theta(t-t') [D_q^K(t-t') - D_{-q}^K(t'-t)] \quad (3.24)$$

also

$$\chi_{q,q'}(t,t') = \chi_q(t-t')$$

Definieren wir als Fouriertransformierte der linearen Antwortfunktion die Funktion

$$\chi_q(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-t')} \chi_q(t-t') dt', \quad (3.25)$$

setzen (3.24) in (3.25) ein und benutzen die Integraldarstellung der θ -Funktion:

$$\theta(t-t') = i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega + i\varepsilon}, \quad (3.26)$$

dann erhalten wir

$$\chi_q(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{D_q^K(\omega') - D_{-q}^K(-\omega')}{\omega' - (\omega + i\varepsilon)} \quad (3.27)$$

Wir definieren die Spektralfunktion $A_q(\omega)$ durch die Beziehung

$$D_q^K(\omega) = A_q(\omega) [1 + N(\omega)] \quad (3.28)$$

$N(\omega)$ ist die Verteilungsfunktion für Bosonen

$$N(\omega) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \quad (3.29)$$

Die Spektralfunktion gibt an, welche Schwingungszustände im Kristall angeregt werden können.

Im harmonischen Kristall ist die Spektralfunktion durch zwei δ -Funktionen gegeben. In diesem Fall besteht das Anregungsspektrum aus zwei scharfen Linien bei ω_q^0 und $-\omega_q^0$. Sind Anharmonizitäten vorhanden, werden diese Linien verbreitert. Setzen wir (3.18) in (3.27) ein und benutzen (3.28), dann erhalten wir die Spektraldarstellung der linearen Antwortfunktion:

$$\chi_q(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A_q(\omega')}{\omega' - (\omega + i\varepsilon)} \quad (3.30)$$

Gelingt es uns, die lineare Antwortfunktion zu berechnen, dann können wir mit ihrer Hilfe die Möglichkeiten eines Phasenüberganges untersuchen, indem wir die Divergenzen der linearen Antwortfunktion aufsuchen.

Die lineare Antwortfunktion bestimmen wir aus einer Hilfsgröße, der Green'schen Funktion. Für diese lassen sich sukzessive Näherungen angeben.

Die Phononen - Green'sfunktion definieren wir durch

$$D_{q,q'}(t,t') = \frac{i}{\hbar} \langle T [Q_q(t) \dot{Q}_{q'}(t')] \rangle \quad (3.31)$$

T ist der Zeitordnungs-Operator, dessen Wirkungsweise durch

$$T[Q_q(t) Q_{q'}(t')] = \begin{cases} Q_q(t) Q_{q'}(t') & \text{für } t > t' \\ Q_{q'}(t') Q_q(t) & \text{für } t < t' \end{cases} \quad (3.32)$$

festgelegt wird.

Mit den Beziehungen (3.14) und (3.17) folgen die Gleichungen

$$D_{q,q'}(t,t') = D_q(t-t') = \begin{cases} D_q^K(t-t') & \text{für } t > t' \\ D_{-q}^K(t'-t) & \text{für } t < t' \end{cases}$$

$$= \begin{cases} D_q^K(t-t') & \text{für } t > t' \\ D_q^K(t-t'-i\hbar\beta) & \text{für } t < t' \end{cases} \quad (3.33)$$

Wir wollen jetzt das von Matsubara⁽³⁴⁾ entwickelte Konzept der Green'sfunktionen für imaginäre Zeiten benutzen.

Wir betrachten t und t' als rein imaginär. Der Zeitordnungsoperator ordnet die Operatoren nach der Vorschrift

$$T[Q_q(t)Q_{-q}(t')] = \begin{cases} Q_q(t)Q_{-q}(t') & \text{falls } t-t' \text{ auf der} \\ & \text{negativen imagin.} \\ & \text{Achse liegt;} \\ Q_{-q}(t')Q_q(t) & \text{falls } t-t' \text{ auf der} \\ & \text{positiven imagin.} \\ & \text{Achse liegt.} \end{cases} \quad (3.34)$$

Mit dieser Definition und der Beziehung (3.33) erhalten wir die Periodizitätseigenschaft der Green'schen Funktion für rein imaginäre Zeiten:

$$D_q(t-t') = D_q(t - t' - i\hbar\beta) \quad (3.35)$$

Aus der Annahme, daß die Mittelwerte (3.12) für jedes $\beta > 0$ existieren, folgt die Analytizität der Green'schen Funktion im Intervall $[0, \tau]$ mit $\tau = -i\hbar\beta$. Im folgenden beschränken wir $t - t'$ auf dieses Intervall. Ausführliche Diskussionen über die analytischen Eigenschaften sind z.B. bei Matsubara⁽³⁴⁾, Abrikosow⁽³⁵⁾, Bonch-Bruевич⁽³⁶⁾ etc. zu finden.

Wegen der Periodizitätseigenschaft (3.35) können wir die Green'sche Funktion in eine Fourierreihe entwickeln.

$$D_q(t-t') = \frac{1}{\tau} \sum_n e^{-i\omega_n(t-t')} D_q(\omega_n) \quad (3.36)$$

mit

$$\omega_n = \frac{2\pi n}{\tau}$$

$$D_q(\omega_n) = \int_0^{\tau} e^{i\omega_n(t-t')} D_q(t-t') dt \quad (3.37)$$

Setzen wir in (3.37) Gleichung (3.16) ein, wobei diese jetzt auf imaginäre Zeiten im Bereich $t - t' \in [0, \tau]$ übertragen wird, vertauschen die Integrationen und substituieren die Beziehung (3.28), so erhalten wir die Spektraldarstellung der Green'schen Funktion:

$$D_q(\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A_q(\omega')}{\omega' - \omega_n} \quad (3.38)$$

Vergleichen wir diesen Ausdruck mit der Beziehung (3.30) für die lineare Antwortfunktion, dann sehen wir, daß gilt

$$\chi_q(\omega) = D_q(\omega_n \rightarrow \omega + i\varepsilon) \quad (3.39)$$

Dies ist der gesuchte Zusammenhang zwischen der Green'schen Funktion und der linearen Antwortfunktion.

Wenden wir die Dirac'sche Identität

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x) \quad (3.40)$$

auf den Ausdruck (3.38) an, erhalten wir eine Beziehung zwischen Spektralfunktion und Green'scher Funktion (beachte: $A_q(\omega)$ ist eine reelle Funktion!).

$$A_q(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} 2 \operatorname{Im} D_q(\omega_n \rightarrow \omega + i\varepsilon) = 2 \operatorname{Im} \chi_q(\omega) \quad (3.41)$$

Unsere Aufgabe besteht nun darin, eine Gleichung für die Green'sche Funktion aufzustellen, diese zu lösen und durch analytische Fortsetzung zur linearen Antwortfunktion zu kommen.

Wir werden jetzt eine Bestimmungsgleichung für die Green'sche Funktion mithilfe des Formalismus der Funktionalableitung (32) herleiten.

Auf das System lassen wir jetzt eine fiktive äußere Störung wirken, definiert im Zeitintervall $[0, \tau]$:

$$H_{st} = - \sum_q F_q(t) Q_q(t) \quad (3.42)$$

$Q_q(t)$ ist in der Heisenbergdarstellung $Q_q(t) = e^{iHt/\hbar} Q_q e^{-iHt/\hbar}$ gegeben, wobei H der ungestörte Hamiltonoperator (1.1) ist.

Die Erwartungswerte der Normalkoordinaten verschwinden dann nicht mehr. Sie sind gegeben durch

$$\langle Q_q(t) \rangle_F = \text{Tr}(e^{-\beta H_T} [S Q_q(t)]) / \text{Tr}(e^{-\beta H_S}) \quad (3.43)$$

H ist der Hamilton-Operator (3.1) ohne die äußere Störung H_{st} .

Der Index F gibt an, daß der Erwartungswert bei äußerer Störung genommen ist.

S bezeichnet die S -Matrix

$$S = T \left[\exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^\tau dt' \sum_{q'} F_{q'}(t') Q_{q'}(t') \right) \right] \quad (3.44)$$

Es gilt in der paradiastortiven Phase die Gleichung

$$\lim_{F \rightarrow 0} \langle Q_q(t) \rangle_F = \langle Q_q(t) \rangle = 0 \quad (3.45)$$

Fügen wir zu der Kraft F_q noch eine gegen F_q kleine Kraft δF_q hinzu und entwickeln dann den Erwartungswert $\langle Q_q(t) \rangle_{F+\delta F}$ bis zu Gliedern proportional δF_q , erhalten wir:

$$\langle Q_q(t) \rangle_{F+\delta F} = \langle Q_q(t) \rangle_F + \int_0^\tau dt' \sum_{q'} D_{q,q'}^F(t, t') \delta F_{q'}(t'), \quad (3.46)$$

wobei

$$D_{q,q'}^F(t, t') = \frac{i}{\hbar} \left\{ \langle T [Q_q(t) Q_{q'}(t')] \rangle_F - \langle Q_q(t) \rangle_F \langle Q_{q'}(t') \rangle_F \right\} \quad (3.47)$$

D^F geht im limes $F \rightarrow 0$ in die Green'sche Funktion über.

D^F wird Funktionalableitung von $\langle Q_q(t) \rangle_F$ nach F_q genannt und mit

$$D_{q,q'}^F(t, t') = \frac{\delta}{\delta F_{q'}(t')} \langle Q_q(t) \rangle_F \quad (3.48)$$

bezeichnet.

Von der Funktionalableitung D^F kann erneut die Funktionalableitung gebildet werden, und man erhält nach etwas umständlicher Rechnung (mit Benutzen von (3.47)):

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta}{\delta F_{q''}^{(t'')}} D_{qq'}^F(t, t') &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle T[Q_q(t) Q_{q'}(t') Q_{q''}(t'')] \rangle_F \\
 &- \left(\frac{i}{\hbar}\right) D_{qq'}^F(t, t') \langle Q_{q''}(t'') \rangle_F - \frac{i}{\hbar} D_{qq''}^F(t, t'') \langle Q_{q'}(t') \rangle_F \\
 &- \frac{i}{\hbar} D_{q'q''}^F(t', t'') \langle Q_q(t) \rangle_F - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \langle Q_q(t) \rangle_F \langle Q_{q'}(t') \rangle_F \langle Q_{q''}(t'') \rangle_F.
 \end{aligned}
 \tag{3.49}$$

Höhere Funktionalableitungen benötigen wir für unsere weiteren Rechnungen nicht.

Zur Ableitung der Bewegungsgleichung für die Green'sche Funktion berechnen wir zunächst

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle Q_q(t) \rangle_F.$$

Folgende Umschreibung von $\langle Q_q \rangle_F$ ist dabei nützlich:

$$\langle Q_q(t) \rangle_F = \text{Tr} \left[e^{-\beta H_S(\tau, t)} Q_q(t) S(t, 0) \right] / \text{Tr} \left[e^{-\beta H_S} \right]. \tag{3.50}$$

Wir erhalten

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle Q_q(t) \rangle_F = \langle \dot{Q}_q(t) \rangle_F$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle Q_q(t) \rangle_F = \langle \ddot{Q}_q(t) \rangle_F + F_{-q}(t) \tag{3.51}$$

Nach Einsetzen der Bewegungsgleichung (3.11) in (3.51) erhalten wir

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle Q_q(t) \rangle_F + \omega_q^2 \langle Q_q(t) \rangle_F + \frac{1}{3!} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{qq_1 q_2 q_3}^{(4)} \langle Q_{q_1}(t) Q_{q_2}(t) Q_{q_3}(t) \rangle_F \\
 = F_{-q}(t).
 \end{aligned}
 \tag{3.52}$$

Von diesem Ausdruck bilden wir die Funktionalableitung.

Dabei benutzen wir die Beziehung $\frac{\delta f(y)}{\delta f(x)} = \delta(x - y)$. Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega_q^2 \right) D_{qq'}^F(t, t') + \frac{1}{3!} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{qq_1 q_2 q_3}^{(4)} \frac{\delta}{\delta F_{q'}(t')} \langle Q_{q_1}(t) Q_{q_2}(t) Q_{q_3}(t) \rangle_F \\
 = \delta_{q, q'} \delta(t - t')
 \end{aligned}
 \tag{3.53}$$

Die δ -Funktion für imaginäre Zeiten definieren wir als periodisch

$$\delta(t - t' + \tilde{\tau}) = \delta(t - t'). \tag{3.54}$$

Sie hat die gleichen Eigenschaften wie für reelle Zeiten, nur das Integrationsgebiet reicht nicht von $-\infty$ bis $+\infty$, sondern von 0 bis τ .

Wegen der Periodizitätseigenschaft können wir später die Fourierdarstellung der δ -Funktion benutzen:

$$\delta(t-t') = \frac{1}{\tau} \sum_n e^{-i\omega_n(t-t')} \quad (3.55)$$

Für die Dreipunktkorrelationsfunktion in Gleichung (3.53) setzen wir den entsprechenden Ausdruck aus Gleichung (3.49) ein und erhalten unter Benutzung der Einsteinschen Summenkonvention (über doppelt auftretende Indizes wird summiert):

$$\begin{aligned} & (\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega_q^2) D_{qq'}^F(tt') + \frac{1}{3!} U_{-q_1 q_2 q_3}^{(4)} \frac{\delta}{\delta F_{q_1}(t')} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta}{\delta F_{q_3}(t)} D_{q_1 q_2}^F(tt) \right] \\ & + \frac{1}{2} U_{-q_1 q_2 q_3}^{(4)} \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F \langle Q_{q_2}(t) \rangle_F D_{q_3 q'}^F(tt') \\ & + \frac{1}{2} U_{-q_1 q_2 q_3}^{(4)} \frac{\hbar}{i} D_{q q_2}^F(tt) D_{q q'}^F(tt') \\ & + \frac{1}{2} U_{-q_1 q_2 q_3}^{(4)} \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\delta}{\delta F_{q_1}(t')} D_{q q_2}^F(tt) \right] \langle Q_{q_3}(t) \rangle_F \\ & = \delta_{q, -q'} \delta(t - t') \end{aligned} \quad (3.56)$$

D^F ist ein mittelbares Funktional von F_q über die Abhängigkeit von $\langle Q_q \rangle_F$. Für die späteren Rechnungen ist es bequemer, die Funktionalableitung nach F_q in eine Ableitung nach $\langle Q_q \rangle_F$ umzuschreiben. Dies geschieht mit der folgenden Regel (37):

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta F_q(t)} &= \int_0^\tau dt' \left(\frac{\delta \langle Q_{q'}(t') \rangle_F}{\delta F_q(t)} \right) \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q'}(t') \rangle_F} \\ &= \int_0^\tau dt' D_{q' q}^Q(t't) \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q'}(t') \rangle_F} \end{aligned} \quad (3.57)$$

Wir haben die Green'sche Funktion mit einem Q versehen, um damit auszudrücken, daß wir sie im folgenden als Funktional von $\langle Q \rangle$ ansehen wollen. Der Limes $F \rightarrow 0$ ist gleichbedeutend mit $\langle Q \rangle \rightarrow 0$.

Um die Formeln übersichtlicher zu gestalten, werden wir für die Zukunft vereinbaren, daß über überstrichene Zeiten von 0 bis τ integriert wird, damit wird z.B. Gleichung (3.57):

$$\frac{\delta}{\delta F_q(t)} = D_{q' q}^Q(\bar{t}' t) \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q'}(\bar{t}') \rangle_F} \quad (3.58)$$

Wenden wir (3.58) auf (3.56) an, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega_q^2 \right) D_{qq'}^Q(t, t') + \frac{1}{2} U_{-q, q_1, q_2, q_3}^{(4)} \langle Q_{q_1}(t) \rangle \langle Q_{q_2}(t) \rangle D_{qq'}^Q(t, t') \\
 & + \frac{1}{2} U_{-q, q_1, q_2, q_3}^{(4)} \frac{\hbar}{i} D_{qq_2}^Q(t, t) D_{qq'}^Q(t, t') \\
 & + \frac{1}{2} U_{-q, q_1, q_2, q_3}^{(4)} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(t) \rangle} D_{qq_2}^Q(t, t) \right) \times \\
 & \times \langle Q_{q_3}(t) \rangle D_{qq'}^Q(\bar{t}_4, t') \\
 & + \frac{1}{3!} U_{-q, q_1, q_2, q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \left[\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_5}(t) \rangle} D_{q_3, q_4}^Q(t, \bar{t}_4) \times \right. \\
 & \times \left. \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(t) \rangle} D_{q_1, q_2}^Q(t, t) \right] D_{qq'}^Q(\bar{t}_5, t') \\
 & = \delta_{q, -q} \delta(t - t')
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

Wenn wir Gleichung (3.58) auf die Kraft $F_{q''}(t'')$ anwenden, so sehen wir, daß wir mit

$$D_{qq'}^{Q-1}(t, t') = \frac{\delta}{\delta \langle Q_q(t) \rangle_F} F_{q'}(t') \tag{3.60}$$

eine inverse Green'sche Funktion definieren können, so daß

$$D_{qq'}^Q(t, \bar{t}') D_{q'q''}^{Q-1}(\bar{t}', t'') = D_{qq'}^{Q-1}(t, \bar{t}') D_{q'q''}^Q(\bar{t}', t'') = \delta_{qq''} \delta(t - t''). \tag{3.61}$$

Denn

$$\frac{\delta}{\delta F_q(t)} F_{q''}(t'') = \delta_{qq''} \delta(t - t'')$$

und andererseits

$$\frac{\delta}{\delta F_q(t)} F_{q''}(t'') = D_{q'q}^Q(\bar{t}', t) \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q'}(\bar{t}') \rangle_F} F_{q''}(t'') \stackrel{\text{s.o.}}{=} \delta_{qq''} \delta(t - t'') \tag{3.62}$$

Für den harmonischen Fall ($U^{(4)} = 0$) folgt aus (3.61) und (3.59)

$$D_{qq'}^{\text{harm}-1}(t, t') = D_{qq'}^{O-1}(t, t') = \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega_q^2 \right) \delta_{q, -q} \delta(t - t') \tag{3.63}$$

Aus Gleichung (3.61) ermitteln wir noch eine Beziehung, die wir gleich benötigen werden. Bilden wir von (3.61) die Funktionalableitung nach $\langle Q_{q_4}(t_4) \rangle_F$ und multiplizieren die entstehende Gleichung mit $D_{q_4 q''}^{Q-1}(t''t''')$, so erhalten wir

$$\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(t_4) \rangle} D_{q_4 q'}^Q(t t') = - D_{q_4 q''}^Q(t \bar{t}'') \left(\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(t_4) \rangle} D_{q'' q_5}^{Q-1}(\bar{t}'' \bar{t}_5) \right) D_{q_5 q'}^Q(t_5 t') \quad (3.64)$$

(Die Variablen sind nach erfolgter Umrechnung umbenannt worden.)

Jetzt multiplizieren wir Gleichung (3.59) mit der inversen Green-Funktion und integrieren und summieren über die entsprechenden Indizes^{†)} (die Definition von $D_{q_1 q'}^{Q-1}$ ist in (3.63) gegeben)

$$\begin{aligned} D_{q_1 q'}^{Q-1}(t t') &= D_{q_1 q'}^{Q-1}(t t') + \frac{1}{2} U_{q_1 q_1 q_2 q'}^{(4)} \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F \langle Q_{q_2}(t) \rangle_F \delta(t-t') \\ &+ \frac{1}{2} U_{q_1 q_1 q_2 q_3}^{(4)} \frac{\hbar}{i} D_{q_1 q_2}^Q(t t) \delta(t-t') \\ &+ \frac{1}{2} U_{q_1 q_1 q_2 q_3}^{(4)} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F} D_{q_1 q_2}^Q(t t) \right) \langle Q_{q_3}(t) \rangle_F \\ &+ \frac{1}{6} U_{q_1 q_1 q_2 q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F} \left(D_{q_3 q_4}^Q(t \bar{t}_4) \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(t_4) \rangle_F} D_{q_4 q_2}^Q(t t) \right) \end{aligned} \quad (3.65)$$

Mithilfe der Gleichung (3.64) ersetzen wir in (3.65) die Funktionalableitungen $\frac{\delta}{\delta \langle Q \rangle} D^Q$ durch $- D^Q \left(\frac{\delta}{\delta \langle Q \rangle} D^{Q-1} \right) D^Q$.

Danach lassen wir die fiktive äußere Störung gegen Null gehen. Damit verschwindet auch $\langle Q_{q_1}(t) \rangle_F$. Wir definieren noch die Dreipunkt- und Vierpunktvertices durch:

$$\begin{aligned} T_{q_1 q_2 q_3}^{(3)}(t_1 t_2 t_3) &:= \lim_{\langle Q \rangle \rightarrow 0} \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_3}(t_3) \rangle_F} D_{q_1 q_2}^{Q-1}(t_1 t_2) \\ T_{q_1 q_2 q_3 q_4}^{(4)}(t_1 t_2 t_3 t_4) &:= \lim_{\langle Q \rangle \rightarrow 0} \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_3}(t_3) \rangle_F} \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(t_4) \rangle_F} D_{q_1 q_2}^{Q-1}(t_1 t_2) \end{aligned} \quad (3.66)$$

$T^{(3)}$ verschwindet in der paradistoritven Phase.

^{†)} genauer: Multiplizieren mit $D_{q'' q'''}^{Q-1}(t'' t''')$, Summieren über q'' , Integrieren über t' ; dann Index umbenennen:
 $(t''', t', t'') \longrightarrow (t', t'', t_5), (q''', q', q'') \longrightarrow (q', q'', q_5)$

Wir erhalten dann die Dyson-Gleichung

$$D^{-1} = D^{0-1} - \widetilde{\Pi}$$

für die inverse Greensche Funktion.

$$\begin{aligned} D_{qq'}^{-1}(tt') &= D_{qq'}^{(0)-1}(tt') + \frac{1}{2} U_{q_1 q_2 q'}^{(4)} \frac{\hbar}{i} D_{q_1 q_2}(tt) \delta(t-t') \\ &\quad - \frac{1}{6} U_{q_1 q_2 q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 D_{q_3 q_4}(t\bar{t}_4) D_{q_1 q_6}(t\bar{t}_3) \Gamma_{q_6 q_5 q' q_4}^{(4)}(\bar{t}_3 \bar{t} t' \bar{t}_4) D_{q_2 q_5}(t\bar{t}_5) \end{aligned} \quad (3.67)$$

Die Selbstenergie $\widetilde{\Pi}_{qq'}(tt')$ ist

$$\begin{aligned} \widetilde{\Pi}_{qq'}(tt') &= - \frac{1}{2} U_{q_1 q_2 q'}^{(4)} \frac{\hbar}{i} D_{q_1 q_2}(tt) \delta(t-t') \\ &\quad + \frac{1}{6} U_{q_1 q_2 q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 D_{q_3 q_4}(t\bar{t}_4) D_{q_1 q_6}(t\bar{t}_3) \times \\ &\quad \times \Gamma_{q_6 q_5 q' q_4}^{(4)}(\bar{t}_3 \bar{t}_5 t' \bar{t}_4) D_{q_2 q_5}(t\bar{t}_5) \end{aligned} \quad (3.68)$$

Unter Benutzung der folgenden Symbole können wir die Dyson-Gleichung (3.67) und die Selbstenergie (3.68) graphisch darstellen.

$$U^{(4)} \longleftrightarrow \square$$

$$\Gamma^{(4)} \longleftrightarrow \blacksquare$$

$$\Rightarrow \longleftrightarrow D$$

$$\rightarrow \longleftrightarrow D^0$$

$$\Rightarrow^{-1} = \rightarrow^{-1} + \text{loop} + \text{bubble}$$

Die Selbstenergie ist im Diagramm



3.2 Ferrodistorptive Phase

Die ferrodistorptive Phase ist dadurch definiert, daß die $q = 0$ -Normalcoordinate einen nicht verschwindenden Erwartungswert hat:

$$\langle Q_{q=0} \rangle \neq 0$$

Wir definieren

$$\langle Q_0 \rangle = a(T) \sqrt{N}. \quad (3.69)$$

Zunächst leiten wir eine implizite Bestimmungsgleichung für $a(T)$ her. Diese gewinnen wir aus der Bewegungsgleichung für $Q_0(t)$. Nach (3.11) lautet diese

$$-\ddot{Q}_0(t) = (w_0 - v_0)Q_0 + \frac{1}{3!} U_{0q_1q_2q_3}^{(4)} Q_{q_1}(t) Q_{q_2}(t) Q_{q_3}(t).$$

Analog dem Vorgehen in Abschnitt 3.1 bilden wir den Mittelwert über diese Gleichung, indem im Dichteoperator zum Hamiltonoperator noch eine fiktive äußere Störung mit den Kraftkomponenten $F_q(t)$ hinzugefügt wird. In der entstandenen Gleichung

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle Q_0(t) \rangle_F + (w_0 - v_0) \langle Q_0(t) \rangle_F + \frac{1}{3!} U_{0q_1q_2q_3}^{(4)} \langle Q_{q_1}(t) Q_{q_2}(t) Q_{q_3}(t) \rangle_F = F_0 \quad (3.70)$$

wird die Dreipunktkorrelationsfunktion mithilfe der Beziehung (3.49) ersetzt.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle Q_0(t) \rangle_F + (w_0 - v_0) \langle Q_0(t) \rangle_F + \frac{1}{3!} U_{0q_1q_2q_3}^{(4)} \left\{ \left(\frac{\hbar^2}{i} \right) \frac{\delta}{\delta F_3(t)} D_{q_1q_2}(tt) + \right. \\ + \frac{\hbar}{i} [D_{q_1q_2}(tt) \langle Q_{q_3}(t) \rangle_F + D_{q_1q_3}(tt) \langle Q_{q_2}(t) \rangle_F + \\ + D_{q_2q_3}(tt) \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F] + \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F \langle Q_{q_2}(t) \rangle_F \langle Q_{q_3}(t) \rangle_F \} \\ = F_0(t). \end{aligned} \quad (3.71)$$

Die oberen Indizes F bzw. Q haben wir zur Vereinfachung weggelassen.

Um die Vertexschreibweise benutzen zu können, formen wir den Term mit der Funktionalableitung um:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta F_{q_3}(t)} D_{q_1 q_2}^F(tt) &= D_{q_4 q_3}(\bar{t}', t) \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(\bar{t}') \rangle_F} D_{q_4 q_2}(tt) \\ &= -D_{q_4 q_3}(\bar{t}', t) D_{q_1 q_4}(t\bar{t}_6) \times \\ &\quad \times \left(\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(\bar{t}') \rangle_F} D_{q_5 q_6}^{-1}(\bar{t}_6 \bar{t}_5) \right) D_{q_5 q_2}(\bar{t}_5 t) \end{aligned} \quad (3.72)$$

Wir führen jetzt den Limes $F \rightarrow 0$ aus. Dann wird

$$\lim_{F \rightarrow 0} \langle Q_q \rangle_F = a(T) \sqrt{N} \delta_{q,0} \quad (3.73)$$

und

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle Q_0 \rangle = 0. \quad (3.74)$$

Als implizite Gleichung für $a(T)$ erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= p a \sqrt{N} + \frac{1}{6} U_{0000}^{(4)} a^3 \sqrt{N^3} + \frac{t}{2i} U_{00q_2 - q_2}^{(4)} D_{q_2}(0) a \sqrt{N} + \frac{1}{3!} U_{0q_1 q_2 q_3}^{(4)} \left(\frac{t}{i}\right)^2 \times \\ &\quad \times D_{q_3}(\bar{t}' t) D_{q_1}(t\bar{t}_6) \tilde{T}_{-q_3 - q_1 - q_2}^{(3)}(\bar{t}_6 \bar{t}_5 \bar{t}') D_{q_2}(\bar{t}_5 t) \end{aligned} \quad (3.75)$$

Wir werden unten sehen, daß für kleine a $\tilde{T}^{(3)} \sim a$. Als triviale Lösung erhalten wir deshalb $a \equiv 0$. Die implizite Gleichung für die nichttriviale Lösung lautet mit $U_{0000}^{(4)} = \frac{t}{N}$ und $\tilde{T}^{(3)} = \frac{\tilde{T}^{(3)}}{a \sqrt{N}}$:

$$\begin{aligned} a^2(T) &= \frac{6}{t} \left[-p - \frac{t}{2i} U_{00q_1 - q_1}^{(4)} D_{q_1}(0) - \frac{1}{3!} U_{0q_1 q_2 q_3}^{(4)} \left(\frac{t}{i}\right)^2 D_{q_3}(\bar{t}' t) D_{q_1}(t\bar{t}_6) \times \right. \\ &\quad \left. \times \tilde{T}_{-q_3 - q_1 - q_2}^{(3)}(\bar{t}_6 \bar{t}_5 \bar{t}') D_{q_2}(\bar{t}_5 t) \right] \end{aligned} \quad (3.76)$$

oder in anderer Schreibweise

$$a^2(t) = -\frac{6}{t} p + \tilde{a}^2 \quad (3.77)$$

Der Sinn dieser Schreibweise liegt darin, daß im klassischen Grenzfall in $\tilde{a}^2$ der temperaturabhängige Anteil steckt. Da wir eine Tieftemperaturentwicklung herleiten wollen, ist es sinnvoll, den gesamten temperaturabhängigen Anteil in die Selbstenergie hineinstecken.

Eine systematische Tieftemperaturentwicklung ist damit sehr viel einfacher anzugeben.

In Diagrammen kann die Gleichung für a^2 folgendermaßen veranschaulicht werden:

$$\frac{\delta a^2}{6} = -p - \text{Diagramm 1} - \text{Diagramm 2} \quad (3.78)$$

ist definiert als $\tilde{\Gamma}^{(3)}$

Als nächsten Schritt leiten wir die Gleichung für die inverse Green'sfunktion in der ferrodistorativen Phase her. Um die Rechnungen zu vereinfachen, gehen wir zu einem neuen Satz von Normalkoordinaten, $\tilde{Q}_q(t)$, über.

$$Q_q(t) = a(T) \sqrt{N} \delta_{q0} + \tilde{Q}_q(t) \quad (3.79)$$

Die neuen Koordinaten haben die Eigenschaft, daß für alle q der Erwartungswert verschwindet.

$$\langle \tilde{Q}_q(t) \rangle = 0. \quad (3.80)$$

Nach Ausführung der Substitution schreiben wir der Einfachheit halber für $\tilde{Q}_q$ wieder Q_q . Der Hamiltonoperator geht unter dieser Substitution über in

$$\begin{aligned} H = & \frac{1}{2} \sum_q (\dot{Q}_q \dot{Q}_{-q} + (w_0 - v_q + \frac{\gamma a^2}{2}) Q_q Q_{-q}) + \frac{1}{3!} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{q_1, q_2, q_3}^{(3)} Q_{q_1} Q_{q_2} Q_{q_3} \\ & + \frac{1}{4!} \sum_{q_1, q_2, q_3, q_4} U_{q_1, q_2, q_3, q_4}^{(4)} Q_{q_1} Q_{q_2} Q_{q_3} Q_{q_4} + Q_0 a \sqrt{N} \left(\frac{\gamma a^2}{6} + w_0 - v_0 \right) \\ & + \frac{Na^2}{2} \left(\frac{a^2 \gamma}{12} + p \right). \end{aligned} \quad (3.81)$$

Hierbei ist

$$U_{q_1, q_2, q_3}^{(3)} = \frac{a \gamma}{\sqrt{N}} \sum_K \delta_{q_1 + q_2 + q_3, K} \quad (3.82a)$$

$$U_{q_1, q_2, q_3, q_4}^{(4)} = \frac{\gamma}{N} \sum_K \delta_{q_1 + q_2 + q_3 + q_4, K} \quad (3.82b)$$

Die Bewegungsgleichung lautet jetzt:

$$\ddot{Q}_q = -\left(p + (v_o - v_q) + \frac{\delta a^2}{2}\right) Q_q - \delta_{q,0} \left[\sqrt{N} \left(\frac{\delta a^3}{3!} + w_o^2 a - v_o a \right) \right] - \frac{1}{2} \sum_{q_1 q_2} U_{-q q_1 q_2}^{(3)} Q_{q_1} Q_{q_2} - \frac{1}{3!} \sum_{q_1 q_2 q_3} U_{-q q_1 q_2 q_3}^{(4)} Q_{q_1} Q_{q_2} Q_{q_3} \quad (3.83)$$

Die weitere Rechnung verläuft völlig analog der Rechnung in der Hochtemperaturphase.

Wir nehmen von Gleichung (3.83) den Mittelwert bei vorhandener äußerer Störung, bilden die Funktionalableitung nach den äußeren Kräften, eliminieren die Korrelationsfunktionen gemäß den Beziehungen (3.47) und (3.49), rechnen die Funktionalableitungen nach den Mittelwerten der Normalkoordinaten um und wenden D^{-1} auf die Gleichung an. Dann ergibt sich folgende Gleichung für D^{-1} :

$$\begin{aligned} D_{qq'}^{-1F}(tt') &= \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + w_o - v_q \right) \delta_{-qq'} \delta(t-t') + \frac{a^2}{2} \delta_{-qq'} \delta(t-t') \\ &+ U_{qq_1 q'}^{(3)} \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F \delta(t-t') + \frac{1}{2} U_{qq_1 q_2}^{(3)} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F} D_{q_1 q_2}(tt) \right) \\ &+ \frac{1}{2} U_{qq_1 q_2 q'}^{(4)} \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F \langle Q_{q_2}(t) \rangle_F \delta(t-t') \\ &+ \frac{1}{2} U_{qq_1 q_2 q'}^{(4)} \frac{\hbar}{i} D_{q_1 q_2}(tt) \delta(t-t') \\ &+ \frac{1}{2} U_{qq_1 q_2 q_3}^{(4)} \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F} D_{q_1 q_2}^F(tt) \right) \langle Q_{q_3}(t) \rangle_F \\ &+ \frac{1}{6} U_{qq_1 q_2 q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_1}(t) \rangle_F} \left(D_{q_3 q_4}^F(t\bar{t}_4) \frac{\delta}{\delta \langle Q_{q_4}(t) \rangle_F} D_{q_1 q_2}^F(tt) \right) \end{aligned}$$

Für a^2 setzen wir die Gleichung (3.76) ein. Als inverse harmonische Greensfunktion definieren wir

$$D_{qq'}^{0-1}(tt') = \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \omega_q^2 \right) \delta_{-qq'} \delta(t-t')$$

mit

$$\omega_q^2 = -2p + (v_o - v_q) \quad (3.84)$$

Mit dieser Definition sind die "harmonischen" Frequenzen temperaturunabhängig.

Den Anteil $\tilde{a}^2$ von a^2 fügen wir der Selbstenergie zu. In der Formulierung mit Vertizes erhalten wir für die inverse Greensfunktion nach Ausführung des Grenzwertes $F_Q \rightarrow 0$ bzw. $\langle Q_Q \rangle \rightarrow 0$ die folgende Gleichung

$$\begin{aligned}
 D_{qq'}^{-1}(tt') &= D_{qq'}^{(0)-1}(tt') - U_{qq_1q_2q'}^{(4)} \frac{\hbar}{i} D_{q_1q_2}(0) \delta(t-t') \\
 &- \frac{1}{2} U_{qq_1q_2}^{(3)} \left(\frac{\hbar}{i} \right) D_{q_1q_3}(t\bar{t}_3) T_{q_3q_4q'}^{(3)} (\bar{t}_3\bar{t}_4t') D_{q_4q_2}(\bar{t}_4t) \\
 &- \frac{1}{2} U_{qq'}^{(4)} \delta(t-t') U_{q_1q_2q_3q_4}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 D_{q_3}(\bar{t}'t) D_{q_1}(t\bar{t}_6) D_{q_2}(\bar{t}_5t) \\
 &\quad \tilde{T}_{q_3-q_1-q_2}^{(3)} (\bar{t}_6\bar{t}_5\bar{t}') \\
 &+ \frac{1}{2} U_{qq_1q_2q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 D_{q_3q_5}(t\bar{t}_5) T_{q_5q_6q'}^{(3)} (\bar{t}_5\bar{t}_6t') D_{q_6q_4}(\bar{t}_6\bar{t}_4) \\
 &\quad D_{q_1q_3}(t\bar{t}_3) T_{q_3q_7q_4}^{(3)} (\bar{t}_3\bar{t}_7\bar{t}_4) D_{q_7q_2}(\bar{t}_7t) \\
 &- \frac{1}{6} U_{qq_1q_2q_3q_4}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 D_{q_3q_4}(t\bar{t}_4) D_{q_1q_6}(t\bar{t}_3) T_{q_6q_5q'q_4}^{(4)} (\bar{t}_3\bar{t}_5t\bar{t}_4) D_{q_5q_2}(\bar{t}_5t)
 \end{aligned}
 \tag{3.85}$$

Die Selbstenergie $\tilde{\Pi}$, definiert durch $D^{-1} = D^{(0)-1} - \tilde{\Pi}$, ist in Diagrammen:

$$\tilde{\Pi} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5}$$

3. Hartree-Näherung

In der bisherigen Diskussion der strukturellen Phasenübergänge spielte die Hartree-Näherung (meist als Self-Consistent-Phonon-Approximation bezeichnet) (22) - (26) eine recht große Rolle.

Deshalb skizzieren wir kurz die Hartree-Näherung in dem in den Abschnitten 3.1 und 3.2 entwickelten Formalismus.

Bei der Hartree-Näherung wird nur der erste Term der Selbstenergie berücksichtigt.

In der paradistortiven Phase lautet die Dyson-Gleichung für die Hartree-Näherung (nach Fouriertransformation)

$$D_q^{-1}(\omega_n) = D_q^{0-1}(\omega_n) + \frac{\hbar}{2i} \sum_{q_1} U_{q-q_1, q_1}^{(4)} \frac{1}{\tau} \sum_m D_q(\omega_m) \quad (3.86)$$

In Diagrammen: 

Mit dem Ansatz $D_q^{-1}(\omega_k) = -\omega_k^2 + \omega_q^2$ erhalten wir aus (3.86) nach Ausführung der Summation über m (mithilfe der Formel (4.8))

$$\omega_q^2 = \omega_q^{02} + \frac{\hbar}{4} \sum_{q_1} U_{q-q_1, q_1}^{(4)} \frac{1}{\omega_{q_1}} \coth \frac{\hbar \beta \omega_{q_1}}{2} \quad (3.87)$$

Für den klassischen Fall ergibt sich daraus. (im folgenden setzen wir die Boltzmannkonstante k gleich 1)

$$\omega_q^2 = \omega_q^{02} + \frac{T}{2} \sum_{q_1} U_{q-q_1, q_1}^{(4)} \frac{1}{\omega_{q_1}^2} \quad (3.88)$$

In Debye-Näherung läßt sich die Summe leicht auswerten.

Für $q = 0$ erhalten wir

$$\omega_0^2 = p + \frac{3\hbar T}{2\pi^2 v_0} \left[q_D - \frac{\omega_0}{\sqrt{\frac{v_0}{6}}} \arctan \frac{q_D \sqrt{\frac{v_0}{6}}}{\omega_0} \right]$$

Aus dieser Gleichung folgt, daß $\omega_0 = 0$ nur dann möglich ist, wenn $p \leq 0$ ist. Da wir uns besonders für den Verlauf von ω_0 in der Nähe von $\omega_0 = 0$ interessieren, setzen wir $p \leq 0$ voraus. Mit den Abkürzungen

$$\omega_D = q_D \sqrt{\frac{v_0}{6}}$$

$$T_C = \frac{2\pi^2 v_0 |p|}{3\hbar q_D} \quad (3.89)$$

gilt

$$\omega_0^2 = -|p| + |p| \frac{T}{T_C} \left[1 - \frac{\omega_0}{\omega_D} \arctan \frac{\omega_D}{\omega_0} \right] \quad (3.90)$$

Hieraus folgt, daß $\omega_0 = 0$ nur für $T = T_C$ möglich ist. Es gilt also

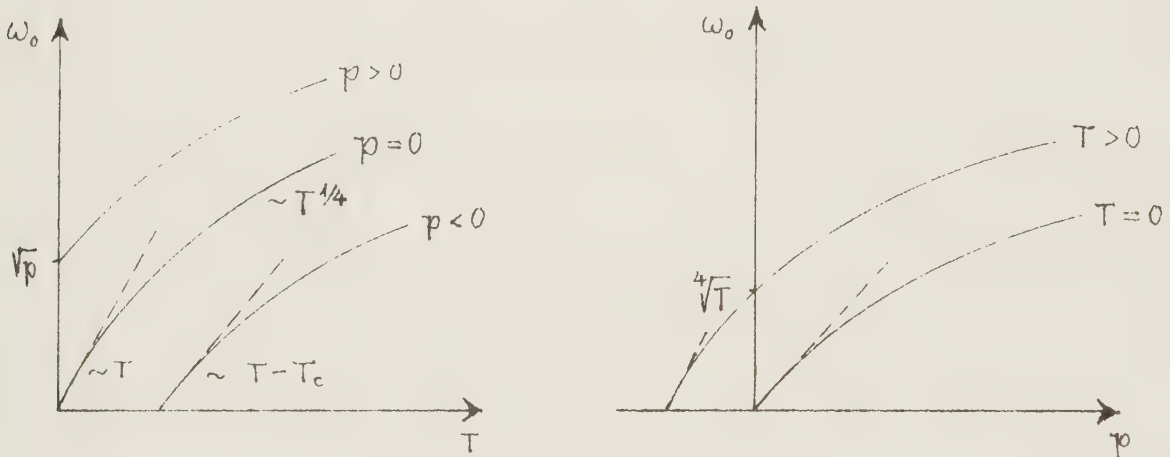
$$\omega_0(T_C) = 0.$$

Entwickeln wir den Arctan in Gleichung (3.90) für kleine ω_0 bis zum Glied proportional zu ω_0 und lösen die quadratische Gleichung für ω_0 , dann gilt

$$\omega_0 \approx (T - T_c) \frac{2qD}{\pi T} \sqrt{\frac{6}{v_0}} \quad (3.91)$$

Für große ω_0 erhalten wir $\omega_0 \sim T^{1/4}$.

In den beiden Abbildungen ist ω_0 in Abhängigkeit von T und von p aufgetragen.



In der ferrodistortiven Phase haben wir die Gleichung für die Phononenfrequenz und den Ordnungsparameter zu lösen

$$\omega_0^2 = -2p + \frac{v_0}{6} q^2 - \frac{\hbar}{i} \sum_{q_1} U_{q-q_1, q_1}^{(4)} \frac{1}{\tau} \sum_m D_{q_1}(\omega_m) \quad (3.92)$$

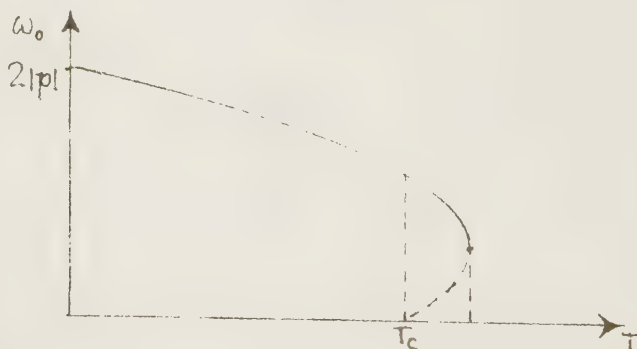
$$a^2 = \frac{6}{\hbar} \left[-p - \frac{1}{2i} \sum_{q_1} U_{00q_1, q_1}^{(4)} \frac{1}{\tau} \sum_m D_{q_1}(\omega_m) \right] \quad (3.93)$$

Wir sehen, daß wegen $a^2 = \frac{3}{\hbar} \omega_0^2$ mit der Lösung von ω_0^2 auch diejenige für a^2 bestimmt ist.

Nach Ausführen der Summation über m und Integration über q_1 in Debye-Näherung erhalten wir für ω_0^2 im klassischen Fall

$$\omega_0^2 = -2p - \frac{2T}{T_c} |p| \left[1 - \frac{\omega_0}{\omega_D} \arctan \frac{\omega_D}{\omega_0} \right] \quad (3.94)$$

Diese Gleichung hat im Bereich $0 \leq T < T_c$ genau eine Lösung. Im übrigen Bereich von T , für den ω_0 definiert ist ($T \geq T_c$), gibt es zu jedem T genau zwei Werte von ω_0 . In der Abbildung ist $\omega_0(T)$ skizziert.



4. Tieftemperaturentwicklung

Die gesuchte Tieftemperaturentwicklung für $\chi_o^{-1}(0)$, a^2 und ω_o^2 erhalten wir aus den Gleichungen (3.67), (3.76) und (3.85). In der paradistortiven Phase wird dazu die Selbstenergie in eine Reihe von Termen entwickelt; die nur die harmonischen Greenschen Funktionen enthalten und verbunden sind durch $U^{(4)}$ -Wechselwirkungen.

Für den klassischen Fall ergibt dies eine Reihe, die formal geschrieben werden kann

$$\Pi_q(\omega; p, T) = \sum_{n=1}^{\infty} T^n \Pi_q^{(n)}(\omega; p) \quad (4.1)$$

Die Koeffizienten $\Pi_q^{(n)}(\omega; p)$ sind die Summe aller Selbstenergieanteile proportional T^n und im allgemeinen komplexe Größen. Nur diejenigen Selbstenergieanteile von $\Pi_q^{(n)}$ tragen zum Imaginärteil bei, die von ω abhängen. Die von ω unabhängigen Anteile sind rein reell.

Die Tieftemperaturentwicklung der inversen statischen Suszeptibilität ist einfach (in der paradistortiven Phase)

$$\chi_q^{-1}(0) = p - \Pi_q(0; p, T) = p - \sum_{n=1}^{\infty} T^n \Pi_q^{(n)}(0; p) \quad (4.2)$$

Die $\Pi_q^{(n)}(0)$ sind alle reell.

Die Phononenfrequenz ω_q bestimmt sich aus der Gleichung

$$\begin{aligned} \chi_q^{-1}(\omega_q; p, T) &= 0, \text{ d.h.} \\ -\omega_q^2 + p - \sum_{n=1}^{\infty} T^n \Pi_q^{(n)}(\omega_q(T); p) &= 0. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Um die Tieftemperaturentwicklung in der Form

$$\omega_q^2 = \sum_{n=0}^{\infty} T^n b_n(p)$$

zu erhalten, muß $\Pi_q^{(n)}(\omega_q(T); p)$ selbst in eine Reihe nach Potenzen von T gebracht werden. Dieses Problem werden wir in Abschnitt 4.3 betrachten.

In der ferrodistortiven Phase wird das Aufstellen der Tieftemperaturentwicklung dadurch erschwert, daß simultan die Entwicklungen für $\chi^{-1}(\omega)$ und für den Ordnungsparameter durchgeführt werden müssen. Aus den Gleichungen (3.76) und (3.85) erhalten wir zunächst für den Ordnungsparameter und die Selbstenergie Entwicklungen der Art

$$a^2 = \frac{6}{\gamma} \left[-p - \sum_{n=1}^{\infty} T^n f^{(n)}(a^2; p) \right] \quad (4.4)$$

$$\Pi_q(\omega; p, T, a^2) = \sum_{n=1}^{\infty} T^n \Pi_q^{(n)}(\omega; p, a^2) \quad (4.5)$$

$f^{(n)}$ und $\pi^{(n)}$ sind wegen ihrer Abhängigkeit von a^2 wiederum temperaturabhängig und müssen deshalb ebenfalls entwickelt werden. Noch schwieriger als die Aufstellung der Tieftemperaturentwicklung für die inverse statische Suszeptibilität und den Ordnungsparameter ist natürlich das Bestimmen der Phononenfrequenzen, weil $\pi^{(n)}$ dann sowohl über a^2 als auch über ω_q von T abhängt. Dieser Frage werden wir ebenfalls in Abschnitt 4.3 ausführlicher nachgehen.

4.1 Tieftemperaturentwicklung in erster Ordnung

In der paradistortiven Phase erhalten wir den zu T proportionalen Term, wenn in Gleichung (3.68) für die Selbstenergie nur der erste Summand berücksichtigt wird und darin die vollständige Greensche Funktion durch die harmonische ersetzt wird. Das ist

$$\pi^{(1)} = -\frac{\hbar}{2i} \sum_{q_1} U_{qq_1-q_1q}^{(4)} D_{q_1}^O(0) \delta(t-t') \quad (4.6)$$

Als Diagramm:



Die fouriertransformierte Dyson-Gleichung ist:

$$D_q^{-1}(\omega_n) = D_q^{O-1}(\omega_n) + \frac{\hbar}{2i} \sum_q U_{qq_1-q_1q}^{(4)} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) \quad (4.7)$$

Die Fourierkomponenten der harmonischen Greenschen Funktion sind

$$D_q^O(\omega_m) = (-\omega_m^2 + \omega_q^2)^{-1}$$

Summen der Art $\frac{1}{\tau} \sum_m D_q^O(\omega_m)$ werten wir mithilfe der folgenden Beziehung aus. Die Funktion $G(\omega)$ habe Pole an den Stellen ω_p . Dann ist

$$\frac{1}{\tau} \sum_m G(\omega_m) = \frac{1}{i} \sum_p N(\omega_p) \cdot \left[\text{Residuum von } G(\omega) \text{ an der Stelle } \omega_p \right] \quad (4.8)$$

Wenden wir diese Beziehung auf die Gleichung (4.7) an, dann erhalten wir für die inverse Suszeptibilität

$$\chi_q^{-1}(\omega) = -\omega^2 + \omega_q^2 - \pi^{(1)}$$

mit

$$\pi^{(1)} = -\frac{\hbar}{4} \sum_{q_1} U_{qq_1-q_1q}^{(4)} \frac{1}{\omega_{q_1}^2} \coth \frac{\hbar \beta \omega_{q_1}^2}{2}$$

oder im klassischen Fall

$$\pi^{(1)} = -\frac{T}{2} \sum_{q_1} U_{qq_1-q_1q}^{(4)} \frac{1}{\omega_{q_1}^2}$$

In Debye-Näherung ist $\pi^{(1)}$

$$\pi^{(1)} = -\frac{3\gamma T}{2\pi^2 v_O} \left[q_D - \sqrt{\frac{6p}{v_O}} \arctan(q_D \sqrt{\frac{v_O}{6p}}) \right] \quad (4.9)$$

Für kleine p gilt

$$\chi_0^{-1}(0) = p + \frac{3 \gamma T q_D}{2 \pi^2 v_0} - \frac{3^{3/2} \gamma}{2^{3/2} \pi v_0^{3/2}} T \sqrt{V_P} + o(T \sqrt{V_P}) \quad (4.10)$$

p ist in der paradistortiven Phase stets positiv. Deshalb ist für kleine Werte von p und $T > 0$

$$\chi_0^{-1}(0) > 0$$

Dieses Ergebnis bedeutet, daß in der ersten Ordnung der Tieftemperaturentwicklung die statische Suszeptibilität $\chi_0(0)$ in der paradistortiven Phase für $T > 0$ stets endlich bleibt.

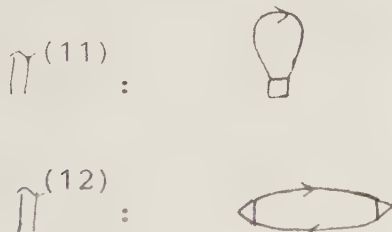
Im Anhang B ist zum Vergleich die Cumulantenentwicklung in der paradistortiven Phase bis zur 1. Ordnung in T angegeben. Gleichung (B 13) liefert das gleiche Resultat wie (4.10).

In der ferrodistortiven Phase tragen zwei Terme zur Selbstenergie in der ersten Ordnung bei.

$$\pi_q^{(11)}(t-t') = \frac{\hbar}{i} \sum_{q_1} U_{q q_1 q_1 - q}^{(4)} D_{q_1}^0(0) \mathcal{J}(t-t') \quad \text{und} \quad (4.11)$$

$$\pi_q^{(12)}(t-t') = \frac{\hbar}{2i} \sum_{q_1 q_2} U_{q q_1 q_2}^{(3)} D_{q_1}^0(t-t') D_{q_2}^0(t-t') U_{-q_1 - q_2 - q}^{(3)} \quad (4.12)$$

Als Diagramme



Die erste Ziffer in den Doppelindizes kennzeichnet die Ordnung der Selbstenergieterme im Sinne der Entwicklung (4.5). Die zweite Ziffer numeriert die verschiedenen Terme zur gleichen Ordnung. Die Zugehörigkeit zu einer der beiden Phasen wird nicht besonders gekennzeichnet, in der Hoffnung, daß dadurch keine Verwechslung auftritt.

In der Gleichung (3.76) für a^2 tritt nur $\frac{1}{2} \Pi^{(11)}$ in dieser Ordnung auf.
Die Gleichungen für D^{-1} und a^2 lauten in erster Ordnung

$$D_Q^{-1}(t-t') = D_Q^{O-1}(t-t') - \frac{\hbar}{i} \sum_{q_1} U_{qq_1-q_1-q}^{(4)} D_{q_1}^O(0) \delta(t-t') - \frac{\hbar}{2i} \sum_{q_1, q_2} U_{qq_1q_2}^{(3)} D_{q_1}^O(t-t') D_{q_2}^O(t-t') U_{q-q_1-q_2}^{(3)} \quad (4.13)$$

$$a^2 = -\frac{6}{\gamma} \left[p + \frac{\hbar}{2i} \sum_{q_1} U_{0q-q_1 0}^{(4)} D_{q_1}^O(0) \right] \quad (4.14)$$

oder nach Fouriertransformation der ersten Gleichung

$$D_Q^{-1}(\omega_n) = D_Q^{O-1}(\omega_n) - \frac{\hbar}{i} \sum_{q_1} U_{qq_1-q_1-q}^{(4)} \frac{1}{\tau} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) - \frac{\hbar}{2i} \sum_{q_1, q_2} U_{qq_1q_2}^{(3)} \frac{1}{\tau} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) D_{q_2}^O(\omega_n - \omega_m) U_{q-q_1-q_2}^{(3)} \quad (4.15)$$

$$a^2 = -\frac{6}{\gamma} \left[p + \frac{\hbar}{2i} \sum_{q_1} U_{0q-q_1 0}^{(4)} \frac{1}{\tau} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) \right] \quad (4.16)$$

$\Pi^{(11)}$ wird völlig analog der Rechnung in der paradiastortiven Phase bestimmt. Wir erhalten für den klassischen Fall in Debye-Näherung

$$\Pi^{(11)} = \frac{3T\gamma}{\pi^2 v_0} \left[q_D - \sqrt{\frac{12|p|}{v_0}} \arctan \frac{q_D}{\sqrt{\frac{12|p|}{v_0}}} \right] \quad (4.17)$$

Für kleine p gilt

$$\Pi^{(11)} = \frac{3\gamma T q_D}{\pi^2 v_0} - \frac{3^{3/2} \gamma}{\pi v_0^{3/2}} |p|^{1/2} T + o(T|p|^{1/2}) \quad (4.18)$$

Für große p erhalten wir

$$\Pi^{(11)} = -\frac{\gamma T q_D^3}{12 \pi^2 p} + \text{const.} \frac{1}{p^2} \quad (4.19)$$

Zur Berechnung von $\Pi^{(12)}$ werten wir zunächst die folgende Summe aus.

$$\frac{1}{\tau} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) D_{q_2}^O(\omega_n - \omega_m)$$

Unter Benutzung der Spektraldarstellung für die "harmonische" Spektralfunktion

$$A_q^0(\omega) = 2\pi \text{sign}(\omega) \delta(\omega^2 - \omega_q^2)$$

erhalten wir

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{d\omega''}{2\pi} \left[\frac{\pi}{|\omega_{q_1}^0|} (\delta(\omega' - \omega_{q_1}^0) - \delta(\omega' + \omega_{q_1}^0)) \right] \left[\frac{\pi}{|\omega_{q_2}^0|} (\delta(\omega'' - \omega_{q_2}^0) - \delta(\omega'' + \omega_{q_2}^0)) \right] \times \\ \times \frac{1}{\epsilon} \sum_m \frac{1}{(\omega' - \omega_m)(\omega'' - \omega_m + \omega_m)}$$

Es gilt nach (4.8)

$$\frac{1}{\epsilon} \sum_m \frac{1}{(\omega' - \omega_m)(\omega'' - \omega_m + \omega_m)} = i \frac{1 + N(\omega') + N(\omega'')}{(\omega' + \omega'' - \omega_m)}$$

Der Selbstenergieanteil $\pi^{(12)}$ trägt sowohl zum Realteil als auch zum Imaginärteil der Selbstenergie bei. Real- und Imaginärteil erhalten wir nach analytischer Fortsetzung mithilfe der Dirac'schen Identität und Integration über ω' und ω'' zu

$$\pi_q^{(12)'}(\omega) = \text{Re} \pi_q^{(12)}(\omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon) = \frac{\hbar}{2^2} \sum_{q_1 q_2} U_{qq_1 q_2}^{(3)} U_{-q-q_1-q_2}^{(3)} \frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0} \times \\ \times \left[\frac{(1 + N(\omega_{q_1}^0) + N(\omega_{q_2}^0))(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0)}{(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0)^2 - \omega^2} - \frac{(\omega_{q_1}^0 - \omega_{q_2}^0)(N(\omega_{q_1}^0) - N(\omega_{q_2}^0))}{(\omega_{q_1}^0 - \omega_{q_2}^0)^2 - \omega^2} \right] \quad (4.20)$$

$$\pi_q^{(12)''}(\omega) = \text{Im} \pi_q^{(12)}(\omega_n \rightarrow \omega + i\epsilon) = \frac{\hbar \pi}{2} \sum_{q_1 q_2} U_{qq_1 q_2}^{(3)} U_{-q-q_1-q_2}^{(3)} \frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0} \times \\ \times \left\{ \left[1 + N(\omega_{q_1}^0) + N(\omega_{q_2}^0) \right] \delta(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0 - \omega) \right. \\ \left. + 2 \left[N(\omega_{q_1}^0) - N(\omega_{q_2}^0) \right] \delta(\omega_{q_2}^0 - \omega_{q_1}^0 - \omega) \right. \\ \left. - \left[1 + N(\omega_{q_1}^0) + N(\omega_{q_2}^0) \right] \delta(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0 + \omega) \right\} \quad (4.21)$$

$\pi_q^{(12)}(\omega)$ hängt sowohl von q als auch von ω ab und ist komplex. Wir berechnen $\pi^{(12)}$ der Einfachheit halber nur für $q = 0$. Eine Abschätzung der q -Abhängigkeit, die für $\omega = 0$ sehr leicht durchgeführt werden kann, ergibt

$$\pi_q^{(12)}(0) \sim \frac{\gamma^2 a^2(T)}{\sqrt{|p|}} \cdot \left[1 + O(q) \right]$$

Definitionsgemäß ist

$$\left[U_{q_1 q_2}^{(3)} \right]^2 = \frac{\gamma^2 a^2(T)}{N} \sum_K \delta_{q_1 + q_2, K} \quad (4.22)$$

Von der Summe über K vernachlässigen wir alle Glieder bis auf $K = 0$.
Denn für $K \neq 0$ muß $q_1 = \frac{K}{2}$ und $q_2 = \frac{K}{2}$ sein, d.h. von der Summe über q_1 bleibt genau ein Summand übrig, der für $p \rightarrow 0$ (und $\omega^2 \neq 4\omega_{\frac{K}{2}}^2$) nicht divergiert.

Dagegen gibt es in (4.20) bei $K = 0$ einen für $p \rightarrow 0$ divergenten Summand, nämlich denjenigen mit $q_1 = q_2 = 0$.

Der Realteil ist im klassischen Fall

$$\pi_0^{(12)'}(\omega) = \frac{\gamma^2 a^2(T)}{N} \sum_{q_1} \frac{1}{\omega_{q_1}^2 (4\omega_{q_1}^2 - \omega^2)} \quad (4.23)$$

Das Ergebnis nach Ausführung der Summation über q_1 ist zusammen mit dem Imaginärteil in (4.27) angegeben.

Der Imaginärteil von $\pi^{(12)}$ ist für $q = 0$ im klassischen Grenzfall

$$\pi_0^{(12)''}(\omega) = \frac{6\gamma^2 a^2(T)\pi T}{2^2} \sum_{q_1} \frac{1}{\omega_{q_1}^2} \left[\delta(2\omega_{q_1}^2 - \omega) - \delta(2\omega_{q_1}^2 + \omega) \right] \quad (4.24)$$

$\pi_0^{(12)''}(\omega)$ ist eine ungerade Funktion von ω . Wir berechnen deshalb $\pi^{(12)''}$ nur für $\omega \geq 0$.

Da p in der Tieftemperaturphase negativ ist, gibt $\pi^{(12)}$ nur dann einen Beitrag zur Dämpfung, wenn

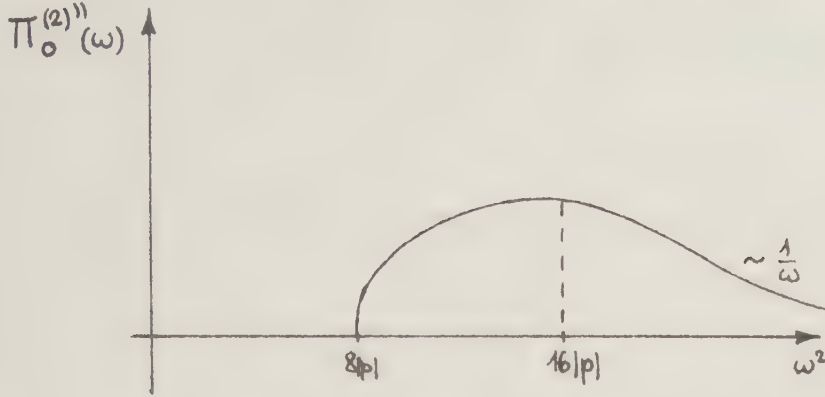
$$\omega^2 \geq 8|p| \quad (4.25)$$

ist. Ansonsten haben die Argumente der δ -Funktionen keine Nullstelle.

Wir erhalten für die Dämpfung

$$\pi_0^{(12)''}(\omega) = \begin{cases} \frac{18T\gamma^2 a^2(T)}{\pi v_0} \frac{\sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_0}}}{\omega^2} & \text{für } \omega^2 \geq 8|p| \\ 0 & \text{für } \omega^2 \leq 8|p| \end{cases} \quad (4.26)$$

Das Maximum von $\pi_o^{(12)''}(\omega)$ liegt bei $\omega^2 = 16|p|$.



Damit ist $\pi_o^{(12)}(\omega)$ gegeben durch

$$\pi_o^{(12)}(\omega) = \begin{cases} \frac{3^2 \chi a^2(\tau) T}{2 \pi^2 v_o^2} \left[\frac{-8p}{\omega^2} \sqrt{\frac{v_o}{-12p}} \arctan q_D \sqrt{\frac{v_o}{-12p}} + \left(\frac{8p}{\omega^2} + 1 \right) \sqrt{\frac{2v_o}{-24p - 3\omega^2}} \arctan q_D \sqrt{\frac{2v_o}{-24p - 3\omega^2}} \right] \\ \text{für } \omega^2 \leq 8|p|; \\ \\ \frac{3^2 \chi a^2(\tau) T}{2 \pi^2 v_o^2} \left[\frac{-8p}{\omega^2} \sqrt{\frac{v_o}{-12p}} \arctan q_D \sqrt{\frac{v_o}{-12p}} + \frac{1}{2} \left(\frac{8p}{\omega^2} + 1 \right) \sqrt{\frac{2v_o}{3\omega^2 + 24p}} \cdot \ln \frac{q_D + \sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}}}{q_D - \sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}}} \right] + \\ + i \frac{18 \chi T p}{\pi v_o} \frac{\sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}}}{\omega^2} \\ \text{für } \omega^2 \geq 8|p| \text{ und } \sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}} < q_D; \\ \\ \frac{3^2 \chi a^2(\tau) T}{2 \pi^2 v_o^2} \left[\frac{-8p}{\omega^2} \sqrt{\frac{v_o}{-12p}} \arctan q_D \sqrt{\frac{v_o}{-12p}} + \frac{1}{2} \left(\frac{8p}{\omega^2} + 1 \right) \sqrt{\frac{2v_o}{3\omega^2 + 24p}} \cdot \ln \frac{\sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}} + q_D}{\sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}} - q_D} \right] + \\ + i \frac{18 \chi T p}{\pi v_o} \frac{\sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}}}{\omega^2} \\ \text{für } \omega^2 \geq 8|p| \text{ und } \sqrt{\frac{3\omega^2 + 24p}{2v_o}} > q_D. \end{cases} \quad (4.27)$$

Wir sind nun in der Lage, die Tieftemperaturentwicklung in der ferrodistoritiven Phase für $\chi_o^{(1)}(0)$, a^2 und ω_o^2 exakt bis zur ersten Potenz in T anzugeben. Dazu muß in $\pi^{(12)}$ für a^2 $\frac{5}{T}|p|$ eingesetzt werden. Wir berücksichtigen bei unseren Betrachtungen zu jeder Potenz von T nur die jeweils führenden Terme für $p \rightarrow 0$.

Das ist für $\pi^{(11)}$ der Ausdruck (siehe (4.18))

$$\pi^{(11)} = \frac{3 \chi T q_D}{\pi^2 v_o} - \frac{3^{3/2} \chi}{\pi v_o^{3/2}} |p|^{1/2} T + O(T|p|) \quad (4.28)$$

Der Realteil von $\pi_0^{(12)}(\omega)$ ist im Bereich $0 \leq \omega^2 \leq 8|p|$ von der Größenordnung

$$\left| \pi_0^{(12)}(\omega) \right| = \frac{3^{5/2} \gamma T \sqrt{|p|}}{2^2 \pi v_0^{3/2}} \alpha(\omega) \quad (4.29)$$

mit einer streng monoton wachsenden Funktion $\alpha(\omega)$ mit $\frac{1}{2} \leq \alpha(\omega) \leq 1$.

Solange ω^2 von der Größenordnung $|p|$ ist, gilt (4.29) mit einem passenden Wert von α . Ist ω^2 von höherer Größenordnung als $|p|$, dann ist $\pi_0^{(12)}(\omega)$ von kleinerer Größenordnung als (4.29).

Wir erhalten in erster Näherung

$$\begin{aligned} \chi_0^{-1}(\omega) &= -\omega^2 + 2|p| - \frac{3 \gamma T q_D}{\pi^2 v_0} + \frac{(2^2 - 3\alpha(\omega)) 3^{3/2} \gamma T \sqrt{|p|}}{2^2 \pi v_0^{3/2}} + O(T|p|) \\ &- \begin{cases} i \frac{18 \gamma T |p|}{\pi v_0} \frac{\sqrt{3\omega^2 - 24|p|}}{\omega^2} & \text{für } \omega^2 \geq 8|p| \\ 0 & \text{für } \omega^2 \leq 8|p| \end{cases} \quad (4.30) \end{aligned}$$

$$a^2 = \frac{3}{\gamma} \chi_0^{-1}(0) + \frac{3^{5/2} \gamma T \sqrt{|p|}}{2^3 \pi v_0^{3/2}} \quad (4.31)$$

Bei der Berechnung des Soft Modes ω_0 aus der Gleichung (4.30) müssen wir beachten, daß $\pi_0^{(12)}$ einen Imaginärteil besitzt. Um denjenigen Teil von $\pi_0^{(12)''}$ zu erhalten, der proportional T ist, muß $\pi_0^{(12)''}(\omega_0^2)$ um die Stelle ω_0^2 nach Potenzen von $(\omega^2 - \omega_0^2)$ entwickelt werden.

$$\pi_0^{(12)''}(\omega_0^2) = \pi_0^{(12)''}(\omega_0^2) + \frac{\partial}{\partial \omega} \left[\pi_0^{(12)''}(\omega) \right] \Big|_{\omega_0^2} \cdot (\omega_0^2 - \omega_0^2) + \dots \quad (4.32)$$

Da aber $\pi_0^{(12)''}$ für $\omega^2 \leq 8|p|$ verschwindet, gilt auch

$$\pi_0^{(12)''}(\omega_0^2) = 0 \quad (4.33)$$

4.2 Tieftemperaturentwicklung in zweiter Ordnung

In der paradistortiven Phase gibt es zwei Terme in der Selbstenergie, die proportional zu T^2 gehen. Wir erhalten den ersten aus Gleichung (3.68), wenn wir im ersten Term die vollständige Greensche Funktion ersetzen durch

$$D^0 \prod D^0$$

und für $\prod$ den zu (4.1) analogen Ausdruck einsetzen. Dann erhalten wir

$$\prod_q^{(21)}(tt) = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 U_{q-q_1-q_1}^{(4)} D_{q_1}^0(t\bar{t}_1) \delta(t-t') D_{q_1}^0(\bar{t}_1 t) D_{q_2}^0(0) U_{q_1-q_1-q_1-q_2}^{(4)} \quad (4.36)$$

oder als Diagramm



Dieser Term ist leicht zu berechnen. Er liefert nur einen von q und ω unabhängigen Beitrag und keine Dämpfung.

Fouriertransformation von $\prod^{(21)}$:

$$\begin{aligned} \prod^{(21)} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \cdot U_{q-q_1-q_1}^{(4)} U_{-q_1 q_1 -q_3 q_3}^{(4)} \times \\ &\times D_{q_3}^0(0) \frac{\hbar}{2i} \frac{1}{\tau^2} \int_0^\tau e^{i\omega_n(t-t')} dt \underbrace{\int_0^\tau \sum_m e^{-i\omega_m(t-t_1)} \sum_k e^{-i\omega_k(t_2-t)} \delta(t-t') D_{q_1}^0(\omega_m) D_{q_1}^0(\omega_k) dt_1}_{\tau \delta_{m,k}} \\ &\underbrace{-\frac{1}{2} \frac{1}{2\omega_{q_3}^0} \coth \frac{\beta\omega_{q_3}^0}{2}}_{-\frac{1}{\tau^2} \sum_k \sum_m D_{q_1}^0(\omega_m) D_{q_1}^0(\omega_k) \int_0^\tau e^{-i\omega_m(t-t_1)-i\omega_k(t_1-t)} dt_1} \end{aligned}$$

$$\prod^{(21)} = -\frac{\hbar}{4} \sum_{q_2} U_{q_1 q_2 -q_2 -q_1}^{(4)} \frac{1}{\omega_{q_2}^0} \coth \frac{\hbar\beta\omega_{q_2}^0}{2} \left(-\frac{\hbar}{2i\tau} \sum_{q_1} U_{q q_1 -q_1 -q}^{(4)} \sum_m D_{q_1}^{02}(\omega_m) \right) \quad (4.37)$$

Die Summation über m führen wir wieder mit der Summenformel (4.8) durch und erhalten

$$\Pi^{(21)} = \left(-\frac{\hbar}{4} \sum_{q_2} U_{q_1 q_2 - q_2 - q_1}^{(4)} \frac{\coth \frac{\beta \hbar \omega_{q_2}^0}{2}}{\omega_{q_2}^0} \right) \left(-\frac{\hbar}{8} \sum_{q_1} U_{q q_1 - q_1 - q}^{(4)} \frac{\coth \frac{\beta \hbar \omega_{q_1}^0}{2}}{\omega_{q_1}^0} \right) \quad (4.38)$$

Der klassische Grenzwert ist

$$\Pi^{(21)} = \left(-\frac{T}{2} \sum_{q_2} U_{q_1 q_2 - q_2 - q_1}^{(4)} \cdot \frac{1}{\omega_{q_2}^0} \right) \left(-\frac{T}{4} \sum_{q_1} U_{q q_1 - q_1 - q}^{(4)} \cdot \frac{1}{\omega_{q_1}^0} \right) \quad (4.39)$$

Die Summationen über q_1 und q_2 führen wir in der Debye-Näherung aus und erhalten aus (4.39):

$$\begin{aligned} \Pi^{(21)} = & \left\{ -\frac{3\hbar T}{2\pi^2 v_0} \left[q_D - \sqrt{\frac{6p}{v_0}} \arctan \frac{q_D \sqrt{v_0}}{\sqrt{6p}} \right] \right\} \\ & \times \left\{ -\frac{3\hbar T}{2^2 v_0^2 \pi^2} \left[-\frac{q_D}{2 \left(\frac{6p}{v_0} + q_D^2 \right)} + \frac{1}{\sqrt{\frac{6p}{v_0}}} \arctan \frac{q_D \sqrt{v_0}}{\sqrt{6p}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.40)$$

Für große p gilt

$$\Pi^{(21)} \approx \frac{T^2 3 q_D^4 \hbar^2}{16 v_0^2 \pi^4 p} \quad (4.41)$$

Für kleine p erhalten wir

$$\Pi^{(21)} \approx \frac{3^{5/2} \hbar^2 T^2 q_D}{2^{9/2} \pi^3 v_0^{5/2} \sqrt{p}} \quad (4.42)$$

Der zweite Term proportional zu T^2 entsteht aus dem zweiten Glied von Gleichung (3.68), wenn die vollständigen Green'schen Funktionen durch harmonische ersetzt werden und für den Vertexteil seine niedrigste Approximation

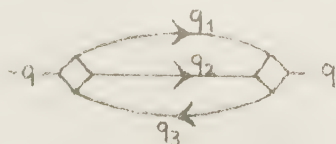
$$T_{q_1 q_2 q_3 q_4}^{(4)}(t_1 t_2 t_3 t_4) = U_{q_1 q_2 q_3 q_4}^{(4)} \delta(t_1 - t_2) \delta(t_1 - t_3) \delta(t_1 - t_4) \quad (4.43)$$

eingesetzt wird.

Wir erhalten

$$\Pi_q^{(22)}(tt') = \frac{1}{6} U_{q q_1 q_2 q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 D_{q_3}^0(tt') D_{q_1}^0(tt') D_{q_2}^0(tt') U_{-q_1 - q_2 - q_3 - q}^{(4)} \quad (4.44)$$

oder als Diagramm



Die Fouriertransformation liefert

$$\tilde{\Pi}_q^{(22)}(\omega_n) = \frac{1}{6} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{q_1, q_2, q_3}^{(4)} \frac{1}{T^2} \sum_{m, k} D_{q_1}^O(\omega_m) D_{q_2}^O(\omega_k) D_{q_3}^O(\omega_n - \omega_m - \omega_k) U_{q - q_1 - q_2 - q_3}^{(4)} \quad (4.45)$$

$\tilde{\Pi}^{(22)}$ ist explizit von ω_n abhängig und kann deshalb einen imaginären Beitrag liefern.

Wir führen die Summation über m und k mithilfe der Formel (4.8) aus und erhalten nach analytischer Fortsetzung auf die reelle Achse ($\omega_n \rightarrow \omega + i\varepsilon$) für den Realteil $\tilde{\Pi}^{(22)}$:

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}_q^{(22)'}(\omega) &= \frac{\hbar^2}{6} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{q_1, q_2, q_3}^{(4)} U_{-q_1 - q_2 - q_3}^{(4)} \frac{1}{2^3 \omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0 \omega_{q_3}^0} \times \\ &\times \left\{ \sum_{k_1, k_2, k_3} k_1 k_2 k_3 \frac{[1 + N(k_2 \omega_{q_2}^0) + N(k_3 \omega_{q_3}^0)] [1 + N(k_1 \omega_{q_1}^0) + N(k_2 \omega_{q_2}^0 + k_3 \omega_{q_3}^0)]}{k_1 \omega_{q_1}^0 + k_2 \omega_{q_2}^0 + k_3 \omega_{q_3}^0 + \omega} \right\} \end{aligned} \quad (4.46)$$

k_1, k_2 und k_3 nehmen die Werte +1 und -1 an.

Im klassischen Limit erhalten wir nach Zusammenfassung von Termen durch Ummumerieren von q -Vektoren

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}_q^{(22)'}(\omega) &= - \frac{1}{24} T^2 \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{q_1, q_2, q_3}^{(4)} U_{-q_1 - q_2 - q_3}^{(4)} \left[\frac{(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0 + \omega_{q_3}^0)^2}{(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0 + \omega_{q_3}^0)^2 - \omega^2} \right. \\ &\quad \left. + 3 \frac{(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0 - \omega_{q_3}^0)^2}{(\omega_{q_1}^0 + \omega_{q_2}^0 - \omega_{q_3}^0)^2 - \omega^2} \right] \frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0 \omega_{q_3}^0} \end{aligned} \quad (4.47)$$

Wir zeigen durch eine Abschätzung, daß $\tilde{\Pi}_0^{(22)'}(\omega)$ gegen $\tilde{\Pi}^{(21)}$ vernachlässigbar ist. Beginnen wir zunächst mit dem einfachen Fall $\omega = 0$.

$$\tilde{\Pi}_0^{(22)'}(0) = - \frac{T^2}{6N^2} \sum_{q_1, q_2} \frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0 \omega_{q_1+q_2}^0} \quad (4.48)$$

Umklaup-Prozesse können wir aufgrund der folgenden Überlegungen vernachlässigen.

Setzen wir $p = 0$, dann divergiert der Ausdruck

$$\frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0 \omega_{q_1+q_2}^0} \text{ für } q_1, q_2 \rightarrow 0 \text{ wie } \frac{1}{q_1^2 q_2^2 (\vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2}.$$

An den Stellen, wo die Summe $q_1 + q_2$ gleich einem reziproken Gittervektor $K \neq 0$ wird, erhalten wir wieder einen divergenten Ausdruck, der die Form $(q_1 + q_2 - K)^{-2}$ hat mit $q_1 \rightarrow \frac{K}{2}$, $q_2 \rightarrow \frac{K}{2}$.

Aus dieser Überlegung wird deutlich, daß der größte Beitrag von $\Pi_0^{(22)'}(0)$ aus der Umgebung um den Mittelpunkt der Brillouinzone herkommt. Wir vernachlässigen deshalb Umklapp-Prozesse und beschränken die Summation über q_1 und q_2 durch die Bedingung $|q_1|, |q_2| \leq q_0$, wobei q_0 so gewählt ist, daß $|q_1 + q_2| < \frac{\pi}{2}$ ist.

In Debye-Näherung erhalten wir

$$\begin{aligned} \Pi_0^{(22)'}(0) &\approx - \frac{T^2}{6(2\pi)^6} \iint_{|q_1|, |q_2| \leq q_0} \frac{d^3 q_1 d^3 q_2}{(p + \frac{v_0}{6} q_1^2) (p + \frac{v_0}{6} q_2^2) (p + \frac{v_0}{6} (\vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2)} \\ &= - \frac{T}{6(\frac{v_0}{6})^3} \frac{2^3 \pi^2}{(2\pi)^6} \int_0^{q_0} \int_0^{q_0} \int_{-1}^1 \frac{q_1^2 dq_1 q_2^2 dq_2 d \cos \vartheta}{(\frac{6p}{v_0} + q_1^2) (\frac{6p}{v_0} + q_2^2) (\frac{6p}{v_0} + q_1^2 + q_2^2 + 2q_1 q_2 \cos \vartheta)} \\ \left| \Pi_0^{(22)'} \right| &\leq - \frac{T^2 q_0}{v_0^3 \pi^4 2^3} \ln^2 \left(1 + \frac{q_0^2 v_0}{24p} \right) \ln \left(1 + \frac{q_0^2 v_0}{24p} \right) \end{aligned} \quad (4.49)$$

Also gilt

$$\left| \widetilde{\Pi}_0^{(22)'}(0) \right| \leq T^2 \ln^3 p \quad (4.50)$$

für $p \rightarrow 0$.

Sokolov (26) gibt als Resultat numerischer Rechnungen an, daß

$$\left| \widetilde{\Pi}_0^{(22)'}(0) \right| \sim T^2 \ln \left(1 + 0,052 \frac{v_0 q_0^2}{6p} \right).$$

Die ω -Abhängigkeit von $\Pi^{(11)'}$ interessiert uns hier nur im Zusammenhang mit der Bestimmung der Phononenfrequenz als Potenzreihe in T bis zur Potenz T^2 . Dann haben wir nur, analog zur Entwicklung (4.33) für $\widetilde{\Pi}(\omega)$, $\Pi^{(22)'}(\omega_0^2)$ zu betrachten. Wie bei $\widetilde{\Pi}^{(11)}(\omega)$ ändert der Übergang von $\omega^2 = 0$ zu $\omega^2 \sim p$ an der Größenordnung des Terms nichts, so daß hier gilt

$$\Pi_0^{(22)}(\omega_0^2) \sim T^2 \ln |p| \quad (4.51)$$

Der Imaginärteil von $\Pi^{(22)}$ ist

$$\begin{aligned} \Pi_q^{(22)''}(\omega) &= - \frac{\pi \hbar^2}{2^4 \cdot 3} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{q q_1 q_2 q_3}^{(4)} U_{-q - q_1 - q_2 - q_3}^{(4)} \frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0 \omega_{q_3}^0} \times \\ &\quad \sum k_1 k_2 k_3 \left[1 + N(k_2 \omega_{q_2}^0) + N(k_3 \omega_{q_3}^0) \right] \left[1 + N(k_1 \omega_{q_1}^0) \right. \\ &\quad \left. + N_2(k_2 \omega_{q_2}^0 + k_3 \omega_{q_3}^0) \right] \delta(k_1 \omega_{q_1}^0 + k_2 \omega_{q_2}^0 + k_3 \omega_{q_3}^0 - \omega) \end{aligned}$$

Im klassischen Grenzfall geht der Imaginärteil von $\tilde{\pi}_q^{(22)}(\omega)$ über in

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}_q^{(22)}(\omega) = & -\frac{\pi}{2^4 \cdot 3} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{q_1 q_2 q_3}^{(4)} U_{-q_1 - q_2 - q_3}^{(4)} \frac{1}{\beta^2 \omega_{q_1}^2 \omega_{q_2}^2 \omega_{q_3}^2} \times \\ & \times \sum_{k_1, k_2, k_3} \left[k_1 \omega_{q_1}^0 + k_2 \omega_{q_2}^0 + k_3 \omega_{q_3}^0 \right] \delta(k_1 \omega_{q_1}^0 + k_2 \omega_{q_2}^0 + k_3 \omega_{q_3}^0 - \omega) \end{aligned} \quad (4.52)$$

Aus dieser Beziehung folgt, daß

$$\tilde{\pi}_0^{(22)}(0) = 0,$$

d.h. der Imaginärteil der Suszeptibilität verschwindet für $q = 0$ und $\omega = 0$.

Eine Abschätzung von $\tilde{\pi}_0^{(22)}(\omega_0)$ liefert einen Ausdruck der Größenordnung T^2 . $\tilde{\pi}_0^{(22)}$ ist der niedrigste Beitrag zum Imaginärteil von $\chi^{-1}(\omega)$ in der Entwicklung bis T^2 . Da wir schon in dieser Näherung den führenden Term zum Imaginärteil nicht exakt berechnen können, wird dies natürlich in den höheren Ordnungen erst recht nicht gelingen.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird aufgrund der eben beschriebenen Schwierigkeiten auf eine genauere Diskussion des Imaginärteils von $\chi^{-1}(\omega)$ und damit auch der Dämpfung der Phononenfrequenz verzichtet; es werden nur die Größenordnungen von $\text{Im } \chi^{-1}$ und vom Imaginärteil des Softmodequadrates abgeschätzt.

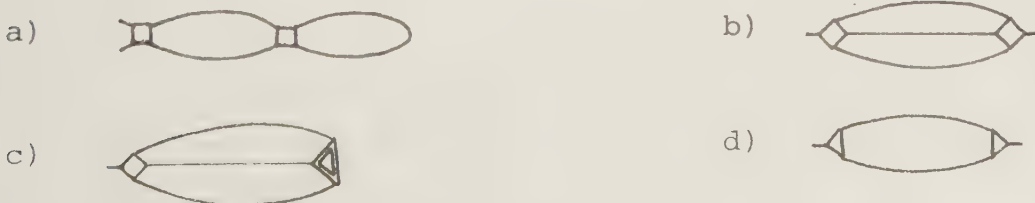
Für Real- und Imaginärteil von $\chi_0^{-1}(\omega)$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \text{Re } \chi_0^{-1}(\omega) = & -\omega^2 + p + \frac{3}{2} \frac{\gamma q_D T}{\pi^2 v_0} - \frac{3^{3/2}}{2} \frac{\gamma T \sqrt{p}}{\pi v_0^{3/2}} - \frac{3^{5/2}}{2} \frac{\gamma^2 q_D T^2}{\pi^3 v_0^{5/2} \sqrt{p}} + O(T^2 \ln |p|) \\ \text{Im } \chi_0^{-1}(\omega) = & O(T^2) \end{aligned} \quad (4.53)$$

Die ω -Abhängigkeit der Selbstenergie ist allein in den mit $O(T^2 \ln |p|)$ und $O(T^2)$ bezeichneten Anteilen enthalten.

Der Term $\sim T \sqrt{p}$ muß berücksichtigt werden, weil er z.B. für $T = O(p)$ von gleicher Größenordnung wie der Term $\sim \frac{T^2}{\sqrt{p}}$ ist.

Zur inversen Suszeptibilität tragen in der ferrodistortiven Phase zur 2. Potenz in T vier Terme bei:



wobei $\triangleleft$ ersetzt wird durch $\frac{U^{(3)}}{a}$

wobei für $U^{(3)} \times U^{(3)} \sim a^2$ der temperaturabhängige Term 1. Ordnung eingesetzt wird.

Die Terme a) und b) sind bereits im Zusammenhang mit der para-distortiven Phase behandelt worden. Die dortige Diskussion gilt hier ebenfalls, wir haben nur p durch $-2p$ zu ersetzen.

a) liefert nur einen Beitrag zum Realteil der Selbstenergie, b) auch einen Beitrag zur Dämpfung.

Den Term c) erhalten wir aus (s. (3.85)):

$$-\frac{1}{3!} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{q_1, q_2, q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 D_{q_3}^O(\bar{t}', t) D_{q_1}^O(t \bar{t}_6) D_{q_2}^O(\bar{t}_5 t) \tilde{T}_{-q_3, -q_1, -q_2}^{(3)}(\bar{t}_6, \bar{t}_5, \bar{t}') \quad (4.55)$$

wenn für $\tilde{T}^{(3)}$ die niedrigste Approximation eingesetzt wird:

$$\tilde{T}_{-q_3, -q_1, -q_2}^{(3)}(t_6, t_5, t') = U_{0, -q_3, -q_1, -q_2}^{(4)} \delta(t_6 - t_5) \delta(t_6 - t') \quad (4.56)$$

In (4.55) ersetzen wir $D_q^O(t_1 t_2)$ durch die Fourierentwicklungen.

Weiterhin wird $\tilde{T}^{(3)}$ durch (4.56) ersetzt. Nach Ausführung der Integrationen über t' , t_5 und t_6 erhalten wir

$$-\frac{1}{3!} \sum_{q_1, q_2, q_3} U_{0, q_1, q_2, q_3}^{(4)} U_{0, -q_1, -q_2, -q_3}^{(4)} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{1}{\tau^2} \sum_{m, l} D_{q_1}^O(-\omega_m - \omega_l) D_{q_3}^O(\omega_m) D_{q_2}^O(\omega_l)$$

Der Vergleich dieses Ausdrucks mit (4.45) zeigt, daß beide identisch sind, wenn wir in (4.45) $\omega_n = 0$ setzen.

Mit (4.50) war dieser Ausdruck bereits abgeschätzt worden und es wurde gezeigt, daß er für kleine p gegen den Beitrag von Term a) vernachlässigt werden kann.

Der Term d) liefert zum Realteil von $\chi_o^{-1}(\omega)$ den Beitrag (s. (4.18) und (4.29)):

$$\frac{3\gamma_T}{\pi^2 v_o} q_D \frac{3^{5/2} \delta_T}{2^3 \pi v_o^{3/2} \sqrt{|p|}} \alpha(\omega) \quad (4.57)$$

$\alpha(\omega)$ ist eine monoton von $\frac{1}{2}$ auf 1 wachsende Funktion von ω im Intervall $[0, 8|p|]$. Damit ist der Term d) von gleicher Größenordnung wie Term a), sogar um den Faktor 3 bis 6 größer.

Einen weiteren Term $\sim T^2$ erhalten wir aus der Entwicklung von $\tilde{\Pi}_0^{(12)}(\omega^2)$, wenn wir den zweiten Summanden

$$\left. \frac{\partial}{\partial \omega} \tilde{\Pi}_0^{(12)}(\omega^2) \right|_{\omega = \omega_0^0} \cdot (\omega_0^2 - \omega_0^{o2})$$

berücksichtigen und für a^2 den Wert $\frac{6|p|}{\gamma}$ einsetzen. Dieser Term ist von der Größenordnung T^2 , kann also gegenüber $\frac{T^2}{\pi|p|}$ vernachlässigt werden. Die inverse Suszeptibilität lautet nun unter Einbeziehung der führenden Beiträge von Term a) und d)

$$\chi_0^{-1}(\omega) = -\omega^2 - 2p - \frac{3\gamma T q_D}{\pi^2 v_0} + \frac{(2^2 - 3\alpha(\omega)) \cdot 3^{3/2} \gamma T \sqrt{|p|}}{2^2 \pi v_0^{3/2}} + \frac{(3\alpha(\omega) - 1) 3^{5/2} q_D T^2 \gamma^2}{2^3 v_0^{5/2} \pi^3 \sqrt{|p|}} + O(T^2 \ln|p|) + i \operatorname{Im} \chi_0^{-1}(\omega) \quad (4.58)$$

mit $\operatorname{Im} \chi_0^{-1}(\omega) = O(T^2)$

In dem mit $O(T^2 \ln|p|)$ bezeichneten Term steckt noch eine weitere ω -Abhängigkeit.

Der Beitrag $\sim T \sqrt{|p|}$ ist die Summe der entsprechenden Anteile von $\pi^{(1)}$ und $\pi^{(2)}$.

In der Entwicklung des Ordnungsparameters nach Potenzen von T tragen in der zweiten Ordnung die beiden Terme



und

c)



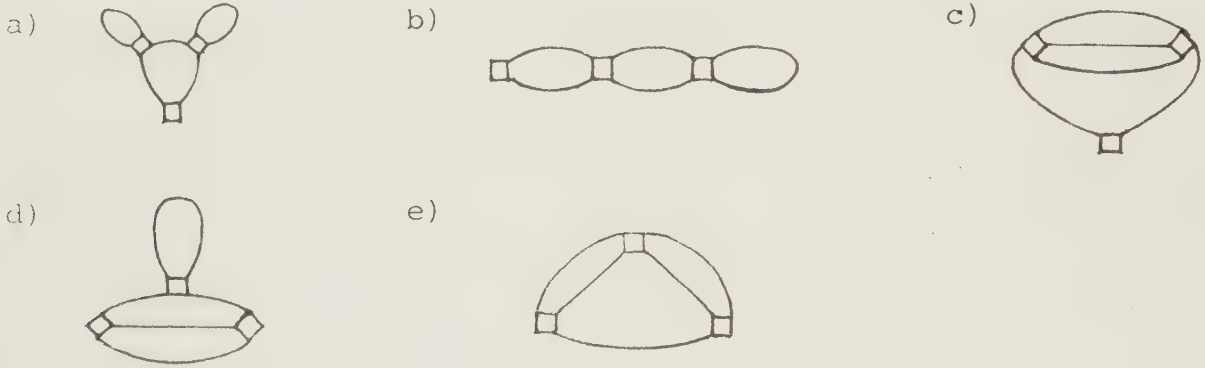
(wobei $\triangleleft$ ersetzt wird durch $\frac{U^{(3)}}{a}$)

bei. Beide Ausdrücke wurden eben im Zusammenhang mit χ^{-1} diskutiert mit dem Ergebnis, daß c) gegen a) vernachlässigbar ist. Berücksichtigen wir dies, dann gilt

$$a^2 = \frac{3}{\gamma} \left[-2p - \frac{3\gamma T q_D}{\pi^2 v_0} + \frac{3^{3/2} \gamma T \sqrt{|p|}}{\pi v_0^{3/2}} - \frac{3^{5/2} \gamma^2 q_D T^2}{2^3 v_0^{5/2} \pi^3 \sqrt{|p|}} + O(T^2 \ln|p|) \right] \quad (4.59)$$

4.3 Tieftemperaturentwicklung für $n \geq 3$

In der dritten Ordnung gibt es 5 Terme zur Selbstenergie in der paradistortiven Phase. Als Diagramme dargestellt sind es



a) und b) liefern zur Selbstenergie nur einen reellen Beitrag, c), d) und e) tragen auch zum Imaginärteil bei.

Die Ausdrücke zu a) und b) lassen sich leicht exakt berechnen. Für den klassischen Kristall erhalten wir in Debye-Näherung



$$\begin{aligned}
 &= - \frac{3\gamma^3 T^3}{2^7 N^3} \sum_{q_1 q_2 q_3} \frac{1}{\omega_{q_1}^6 \omega_{q_2}^2 \omega_{q_3}^2} \\
 &= \left[- \frac{3\gamma T}{2\pi^2 v_0} \left(q_D - \sqrt{\frac{6p}{v_0}} \arctan \frac{q_D \sqrt{v_0}}{\sqrt{6p}} \right) \right]^2 \\
 &\quad \left[- \frac{3^4 \gamma T}{2^4 \pi^2 v_0^3} \left(\frac{-q_D}{\frac{6p}{v_0} + q_D^2} + \frac{q_D}{\frac{6p}{v_0} (\frac{6p}{v_0} + q_D^2)} + \frac{\arctan \frac{q_D \sqrt{v_0}}{\sqrt{6p}}}{2 (\frac{6p}{v_0})^{3/2}} \right) \right] \\
 &\approx - \frac{3^{9/2} \gamma^3 q_D^2}{2^{19/2} v_0^{7/2} \pi^5} \frac{T^3}{p^{3/2}} + o\left(\frac{T^3}{p}\right)
 \end{aligned} \tag{4.60}$$



$$\begin{aligned}
 &= - \frac{\gamma^3 T^3}{8 N^3} \sum_{q_1 q_2 q_3} \frac{1}{\omega_{q_1}^4 \omega_{q_2}^4 \omega_{q_3}^2} \\
 &= - \frac{3T\gamma}{2\pi^2 v_0} \left(q_D - \sqrt{\frac{6p}{v_0}} \arctan \frac{q_D}{\sqrt{6p}} \right) \\
 &\quad \left[- \frac{T\gamma^3}{2\pi^2 v_0^2} \left(\frac{q_D}{\frac{6p}{v_0} + q_D^2} + \frac{1}{\sqrt{\frac{6p}{v_0}}} \arctan \frac{q_D}{\sqrt{\frac{6p}{v_0}}} \right) \right]^2 \\
 &\approx - \frac{3\gamma q_D}{2\pi^2 v_0} \cdot \left(- \frac{3^{3/2} \gamma}{2^{5/2} \pi^{3/2}} \right) \frac{T^3}{p^{3/2}} + o\left(\frac{T^3}{p}\right)
 \end{aligned} \tag{4.61}$$

Die Terme c), d) und e) sind nicht mehr exakt lösbar. Die numerische Berechnung zeigt, daß sie für $p \rightarrow 0$ gegen den Term a) vernachlässigbar sind. Im einzelnen gelten für die Beträge die Abschätzungen (sowohl für $\omega = 0$ als auch für $\omega = \omega_0^0$)

c)  $< T^3 (\log p)^2$

d)  $< T^3 (\log p)^2$

e)  $< T^3 |\log p|$

Der führende Term zu $\chi_0^{-1}(0)$ und auch zu $\chi_0^{-1}(\omega)$ in der dritten Ordnung ist a).

Um den führenden Term zu $\chi_0^{-1}(0)$ in jeder höheren Ordnung zu finden, führen wir die folgende Überlegung durch.

Die größten Divergenzen für $p \rightarrow 0$ treten auf, wenn der Selbstenergieanteil in ein Produkt von Greenschen Funktionen zerfällt, die nicht über die q-Erhaltung miteinander gekoppelt sind.

Das sind im klassischen Fall Ausdrücke der Form (in der n-ten Ordnung)

$$T^n \sum_{q_1 \dots q_k} \frac{1}{\omega_{q_1}^{2n_1}} \frac{1}{\omega_{q_2}^{2n_2}} \dots \frac{1}{\omega_{q_k}^{2n_k}}$$

Die Summe der Exponenten ist in der n-ten Ordnung stets $4n - 2$:

$$\sum_{i=1}^k 2n_i = 4n - 2$$

$(n_i \geq 1)$

Ist $n_i = 1$, dann liefert $\sum_{q_i} \frac{1}{\omega_{q_i}^2}$ einen Beitrag, der für kleine p konstant ist.

Ist $n_i = 2$, dann liefert $\sum_{q_i} \frac{1}{\omega_{q_i}^4}$ einen Beitrag proportional $\frac{1}{T_P}$.

Für $n_i > 2$ erhalten wir einen Beitrag von $\sum_{q_i} \frac{1}{\omega_{q_i}^{2n_i}} \sim \frac{1}{T_P^{2(n_i-1)-1}}$.

Bei der Wahl der Zahlen n_i für den gesamten Selbstenergieanteil erhalten wir dann die größte Divergenz, wenn wir $(n-1)$ mal dem Exponenten den Wert 2 geben und einmal den Wert $2n$. Die Divergenz bezüglich $p \rightarrow 0$ ist dann wie

$$\frac{1}{T_P^{2n-3}}$$

Verteilen wir die Exponenten derart, daß zweimal ein Exponent auftritt, der größer oder gleich 4 ist, und alle anderen sind gleich 2, dann ist die Divergenz um den Faktor $\frac{1}{\sqrt{p}}$ schwächer als im vorhergehenden Fall. Dies liegt daran, daß beim Schritt von 2 auf 4 die Divergenz nur um den Faktor $\frac{1}{\sqrt{p}}$ zunimmt.

Führen wir diesen Schritt zweimal durch, ergibt dies einen Verlust von $\frac{1}{\sqrt{p}}$ gegenüber einer Verteilung, bei der nur einmal ein hoher Exponent auftritt und alle anderen gleich 2 sind.

Sind zwei oder mehr Phononenfrequenzen durch die q-Erhaltung miteinander gekoppelt, dann wird durch die Integration über die Winkel zwischen den gekoppelten q-Vektoren die Divergenz für $p \rightarrow 0$ schwächer. Dies haben wir bei der Abschätzung des Terms $\textcircled{\text{O}}$ (s.4.2) gesehen und als Resultat der numerischen Rechnungen bei den Termen c), d) und e) in der dritten Ordnung.

Nach diesen Überlegungen ist also in jeder Ordnung ($n \geq 2$) der führende Term proportional

$$(-1)^{n+1} a_n \gamma^n \frac{T^2}{\sqrt{p}} \left(\frac{T}{p}\right)^{n-2} \quad (4.62)$$

Die inverse statische Suszeptibilität läßt sich nun schreiben als

$$\chi_0^{-1}(0) = p + \frac{3 \gamma q_D T}{2 \pi^2 v_0} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \left\{ \frac{T^n}{p^{n-3/2}} + o(T^n p^{1-n}) \right\} \quad (4.63)$$

$$\text{mit } c_1 = - \frac{3^{3/2} \gamma}{2^{3/2} \pi v_0^{3/2}}$$

$$c_n = (-1)^{n+1} \frac{(2n-5)!! (2n-2)!}{((n-1)!)^3} \frac{4 \cdot 6^{1/2} \pi p^{3/2}}{v_0^{1/2} q_D} \left[\frac{3 \gamma q_D}{16 v_0 \pi^2 p} \right]^n \quad \text{für } n \geq 2$$

Damit ist gezeigt, daß $\chi_0^{-1}(0)$ sich schreiben läßt als

$$\chi_0^{-1}(0) = p + \frac{3 \gamma q_D T}{2 \pi^2 v_0} + T \sqrt{p} \bigoplus \left(\frac{T}{p}\right)$$

Der Konvergenzradius der unendlichen Reihe ist proportional zu p. Dies folgt analog zu der Bestimmung des Konvergenzradius für die ferrodistorptive Phase im Anhang A.

Die Reihe $\sum_n c_n \frac{T^n}{p^{n-3/2}}$ ist in ihrem Konvergenzbereich höchstens von der Größenordnung $p^{3/2}$. Damit wird $\chi_0^{-1}(0)$ durch die ersten beiden Terme in (4.63) bestimmt. Da $p \geq 0$ ist, gilt $\chi_0^{-1}(0) = 0$ nur für $p=T=0$. In der paradistorptiven Phase wird $\chi_0^{-1}(0)$ nur an der displaziven Grenze gleich Null.

Zur Berechnung von ω_0^2 muß die Gleichung

$$\omega_0^2 = p - \tilde{\Pi}_0(\omega_0) \quad (4.64)$$

gelöst werden, wobei ω_0^2 in der Regel eine komplexe Zahl ist. Um den führenden Term zu jeder Potenz von T zu finden, muß $\pi_{(0)}(\omega_0)$ ebenfalls in eine Reihe um ω_0^0 entwickelt werden. Dann liefern z.B. auch $\pi_{(1)}^{(n)}$ und $\pi_{(2)}^{(n)}$ Beiträge zu allen höheren Potenzen von T. Die Größe dieser Beiträge können wir nicht berechnen, sondern nur die Größenordnung angeben.

Wir können $\pi_0(\omega)$ als eine von ω^2 abhängige Funktion betrachten. Eine etwas umständliche, aber nicht sehr schwierige Betrachtung zeigt, daß für reelle ω stets gilt, daß für jedes n Im $\pi_0^{(n)}(\omega)$ höchstens von der Größenordnung des zugehörigen Realteils ist. In der obigen Bestimmungsgleichung (4.64) für ω_0^2 entwickeln wir $\pi_0^{(n)}(\omega_0^2)$ und erhalten

$$\omega_0^2 = p - \sum_{n=1}^{\infty} T^n \pi_0^{(n)}(\omega_0^2) = p - \sum_{n=1}^{\infty} T^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \pi_0^{(n,k)}(\omega_0^2) [\omega_0^2 - \omega_0^2]^{(k)} \quad (4.65)$$

Die Koeffizienten $\pi_0^{(n,k)}$ und auch $[\omega_0^2 - \omega_0^2]^{(k)}$ sind komplexe Größen.

$[\omega_0^2 - \omega_0^2]^{(k)}$ ist wieder eine unendliche Reihe, in der alle Potenzen von T auftreten:

$$[\omega_0^2 - \omega_0^2]^{(k)} \sim \left[T + c_0 T \sqrt{p} + c_1 \frac{T^2}{\sqrt{p}} + c_2 \frac{T^3}{p^{3/2}} + \dots + i(d_1 T^2 + \dots) \right]^k \quad (4.66)$$

Die Gleichungen (4.65) und (4.66) müssen simultan und schrittweise für $n = 2, 3, \dots$ gelöst werden.

Der ω -unabhängige Anteil von $\pi^{(n)}$ ist proportional $\frac{T^n}{p^{n-3/2}}$. Die explizit ω -abhängigen Anteile von $\pi^{(n)}$ für reelle ω^2 sind wegen der durchzuführenden Integration über Winkel zwischen den q-Vektoren höchstens von der Größenordnung $\frac{T^n}{p^{n-5/2}}$ (bis auf logarithmische

Singularitäten - vergleiche die Abschätzungen der Terme zu $\pi^{(3)}$) und zwar für ω^2 im Bereich zwischen 0 und $O(p)$. Wir müssen uns noch klarmachen, daß die Beiträge von $\pi^{(m,k)}$ mit $m < n$ zur Potenz T^n zu den Real- und Imaginärteilen von ω_0^2 , die in der Entwicklung

(4.65) auftreten, dem Betrage nach kleiner als $\frac{T^n}{p^{n-3/2}}$ sind.

Vor den q-Integrationen tritt ω^2 in $\pi^{(m)}(\omega)$ in Ausdrücken der Art

$$\frac{1}{(\sum \omega_{q_i})^2 - \omega^2} \quad \text{oder} \quad \frac{\omega^2}{(\sum \omega_{q_i})^2 - \omega^2}$$

auf.

Differenzieren wir nach ω und setzen $\omega = \omega_0^0$, dann wird die Divergenz von $\pi^{(m,1)}$ für $p \rightarrow 0$ um einen Faktor der Größenordnung $\frac{1}{p^{1/2}}$ verstärkt. Jede weitere Differentiation nach ω erhöht die Divergenz um einen Faktor $\frac{1}{p^{1/2}}$. Damit gilt, daß die Real- und Imaginärteile von

$\pi_0^{(m,k)}(\omega_0^2)$ höchstens von der Größenordnung $T^m p^{5/2-m-k/2}$ sind.

Diesen Ausdruck müssen wir nach (4.65) noch mit $[\omega_o^2 - \omega_o^{o2}]^k$ multiplizieren. Damit ein Beitrag $\sim T^n$ möglich ist, muß $k \leq n - m$ sein. Zur Potenz T^{n-m} trägt $[\omega_o^2 - \omega_o^{o2}]^k$ höchstens $\frac{T^{n-m}}{p^{n-m-3k/2}}$ bei. Damit liefert $\prod_o^{(m,k)}$ zu T^n höchstens einen Term der Größenordnung

$$\prod_o^{(m,k)} (\omega_o^2) [\omega_o^2 - \omega_o^{o2}]^k \sim \frac{T^n}{p^{n-5/2-3k/2}}$$

Diese Abschätzung gilt sowohl für den Real- als auch den Imaginärteil, den $\prod_o^{(m,k)}$ zu ω_o^2 in der Ordnung T^n beiträgt. Damit haben wir als Resultat erhalten, daß in der paradistortiven Phase gerade die ω -unabhängigen Terme die führenden Beiträge zum Realteil in der Entwicklung von ω_o^2 liefern, und es gilt in der Näherung mit den führenden Beiträgen bezüglich p

$$\omega_o'' = \chi^{-1}(0) = p + \frac{3 \gamma T q_D}{2 \pi^2 v_o} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \frac{T^n}{p^{n-3/2}} \quad (4.67)$$

In jeder Ordnung bezüglich T ist der Imaginärteil um wenigstens einen Faktor $p^{1/2}$ kleiner als der führende Beitrag des Realteils in dieser Ordnung. Der Imaginärteil beginnt mit dem Glied $\sim T^2$. Für T im Konvergenzbereich sind auch die Terme mit höherer Potenz von T höchstens von der gleichen Größenordnung. Damit ist

$$\omega_o'' = O(T^2).$$

Wenden wir uns nun der ferrodistortiven Phase zu. Für den Ordnungsparameter können wir aufgrund von Gleichung (3.76) schreiben

$$a^2 = \frac{3}{\gamma} \left[\hat{\chi}_o^{-1} + \tilde{\chi}^{-1}(a^2) \right] \quad (4.68)$$

$\hat{\chi}_o^{-1}$ entspricht den ersten beiden Summanden in (3.76) und ist unabhängig von a . $\tilde{\chi}_o^{-1}(a^2)$ kennzeichnet die Beiträge von dem dritten Summanden. Wir zeigen jetzt, daß die führenden Terme zu jeder T -Potenz von $\tilde{\chi}_o^{-1}$ festgelegt werden und berechnen sie dann. Die führenden Beiträge von $\tilde{\chi}_o^{-1}$ liefern die Ausdrücke

$$\tilde{\pi}^{(n)} = \left\{ \frac{\hbar}{i\tau} \sum_{q_1} U_{q_1 q_1 q_1 q_1}^{(4)} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) \right\}^{n-1} \left\{ \frac{\hbar}{i\tau} \sum_{q_2} U_{q_2 q_2 q_2 q_2}^{(4)} \sum_k \left[D_{q_2}^O(\omega_k) \right]^n \right\} \quad (4.69)$$

die im Anhang A berechnet werden. Es ist

$$\tilde{\pi}^{(n)} \sim \frac{T^n}{|p|^{n-3/2}}$$

$\tilde{\chi}^{-1}(a^2)$ besteht aus Termen, bei denen q -Vektoren gekoppelt sind und deshalb Integrationen über die Winkel zwischen diesen ausgeführt werden müssen. Diese Integrationen reduzieren die Exponenten von $|p|$ um wenigstens 1 (die Divergenzen durch $\ln|p|$ beachten wir nicht). Damit vernachlässigen wir diese Terme. Noch eher können wir diejenigen Terme

von $\tilde{\chi}^{-1}(a^2)$ vernachlässigen, die mit a^{2n} multipliziert werden.

Definieren wir formal $(2n-5)!! = 1$ für negative Werte in der Klammer, dann gilt

$$\begin{aligned} a^2 &= \frac{3}{\gamma} \hat{\chi}^{-1} = \frac{3}{\gamma} \left[2|p| - \frac{3\gamma T q_D}{\pi^2 v_0} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{3^{n+1/2} (2n-2)!! (2n-5)!! q_D^{n-1} \gamma^n}{[(n-1)!]^3 2^{4n-4} \pi^{2n-1} v_0^{n+1/2} |p|^{n-3/2}} T^n \right] \\ &= \frac{6}{\gamma} \left[|p| - \frac{3\gamma T q_D}{2\pi^2 v_0} - T \sqrt{|p|} \Phi^F\left(\frac{T}{|p|}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.70)$$

Die inverse statische Suszeptibilität schreiben wir

$$\chi_0^{-1}(0) = \frac{\gamma}{3} a^2 + \tilde{\chi}^{-1}(a^2) \quad (4.71)$$

In $\frac{\gamma}{3} a^2$ sind diejenigen Anteile zusammengefaßt, die wir bereits bei der Diskussion von a^2 betrachtet haben. Noch zu diskutieren sind die Entwicklungen aus den durch die folgenden Diagramme dargestellten Terme (s. (3.85))



Für die Terme a) und b) trifft die gleiche Argumentation wie bei der Diskussion von a^2 zu mit der Konsequenz, daß wir beide Terme vernachlässigen. Anders sieht es mit dem Term c) aus. Der führende Beitrag wird von $\pi_0^{(12)}(0)$ (s. (4.27)) geliefert, und dieser ist von gleicher Größenordnung wie $\hat{\chi}_0^{-1}$. Mithilfe von (4.27) können wir nun $\tilde{\chi}_0^{-1}(a^2)$ angeben

$$\tilde{\chi}_0^{-1} = - \frac{3^{5/2} \gamma}{2^4 v_0^{3/2} \pi} \frac{T}{\sqrt{|p|}} \frac{\gamma}{3} a^2$$

Damit ist $\chi_0^{-1}(0)$ gegeben durch

$$\chi_0^{-1}(0) = \frac{\gamma}{3} a^2 \cdot \left(1 - \frac{3^{5/2} \gamma}{2^4 v_0^{3/2} \pi} \frac{T}{\sqrt{|p|}} \right) \quad (4.72)$$

Lassen wir T von $T = 0$ an wachsen, dann wird der zweite Faktor erst dann Null, wenn a^2 bereits negativ geworden ist.

Als nächsten Schritt geben wir die Gleichung für ω_0^2 an, die aus

$$\chi_0^{-1}(\omega_0) = 0$$

folgt. Analog zu den Betrachtungen, die wir bei der Diskussion dieser Gleichung in der paradistortiven Phase durchgeführt haben, gilt hier ebenfalls

$$\begin{aligned} \text{Re } \omega_0^2 &= \chi_0^{-1}(0) \\ \text{Im } \omega_0^2 &= O(T^2) \end{aligned} \quad (4.73)$$

Abschließend geben wir noch die Tieftemperaturentwicklungen für $\chi_0^{-1}(0)$ im 1-, 2- und 4-dimensionalen Fall an.

Im eindimensionalen Fall gilt

$$\chi_0^{-1/P}(0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{F/P} |p|^{1-3n/2} T^n \quad (4.74)$$

Die Koeffizienten a_n^F und a_n^P für die beiden Phasen unterscheiden sich nur durch unwesentliche Zahlenfaktoren und haben eine ähnliche Form wie im 3-dimensionalen Fall. In der paradistortiven Phase sind die Betragsstriche natürlich überflüssig.

Im zweidimensionalen Fall gilt (bis auf logarithmische Singularitäten)

$$\chi_0^{-1/P}(0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{F/P} |p|^{1-n} T^n \quad (4.75)$$

Im vierdimensionalen Kristall gilt

$$\begin{aligned} \chi_0^{-1/P}(0) &= 2|p| - a_0^F T - \sum_{n=1}^{\infty} a_n^F |p|^{-n+2} T^n \\ \chi_0^{-1/P}(0) &= p + a_0^P T + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^P p^{-n+2} T^n \end{aligned} \quad (4.76)$$

4.4 Diskussion der Resultate

Als wesentliche Ergebnisse erhalten wir, daß für die Ableitungen der inversen statischen Suszeptibilität an der Stelle $T = 0$, nämlich

$$\left. \frac{d^n \chi_0^{-1}(0)}{dT^n} \right|_{T=0} = C_n, \quad (4.77)$$

die führenden Beiträge für beliebige n gegeben sind durch

$$\begin{aligned} C_1^P &= \frac{3 \gamma q_D}{2 \pi^2 v_0} - \frac{3^{3/2} \gamma \sqrt{p}}{2^{1/2} \pi^2 v_0^{3/2}} + O(p) \\ C_n^P &= \frac{(-1)^{n+1} \gamma^n 3^{n+1/2} q_D^{n-1} 4(2n-5)!!(2n-2)!}{v_0^{n+1/2} \pi^{2n-1} 2^{4n-1/2} [(n-1)!]^3} \cdot p^{3/2-n} + O(p^{2-n}) \\ &\text{für } n \geq 2. \end{aligned} \quad (4.78)$$

In der ferrodistorativen Phase gilt

$$\begin{aligned}
 C_1^F &= - \frac{3 \gamma q_D}{\pi^2 v_0} + \frac{15 \cdot \sqrt{3} \gamma |p|^{1/2}}{2^3 \pi v_0^{3/2}} + O(|p|) \\
 C_2^F &= \frac{3^{5/2} \gamma^2 q_D |p|^{-1/2}}{2^4 \pi^3 v_0^{5/2}} + O(\ln|p|) \\
 C_n^F &= - \frac{(2n-5)!!(2n-2)!}{((n-1)!)^3} \cdot \frac{3^{1/2} \pi}{v_0^{1/2} q_D} \frac{16 |p|^{3/2}}{q_D} \left[\frac{3 \gamma q_D}{16 v_0 \pi^2 |p|} \right]^n + O(|p|^{2-n})
 \end{aligned}
 \tag{4.79}$$

für $n \geq 3$

In der paradistorativen Phase ist in dieser Näherung, die zu jeder T-Potenz nur die am stärksten divergenten Ausdrücke an der dispersiven Grenze berücksichtigt, der Realteil des Quadrates des Soft-Modes gleich der inversen statischen Suszeptibilität. Der Imaginärteil von ω_0^2 ist in dieser Näherung von kleinerer Größenordnung als der Realteil, $\omega_0''^2 = o(\omega_0'^2)$.

$$\begin{aligned}
 \omega_0'^2 &= \chi_0^{-1}(0) \\
 \omega_0''^2 &= O(T^2)
 \end{aligned}
 \tag{4.80}$$

In der ferrodistorativen Phase gelten entsprechende Beziehungen.

$$\begin{aligned}
 \omega_0'^2 &= \chi_0^{-1}(0) = \frac{\gamma}{3} a^2 \cdot \left[1 - c \frac{T}{\sqrt{|p|}} \right] \\
 \omega_0''^2 &= O(T^2) ; \quad \omega_0'^2 = o(\omega_0'^2)
 \end{aligned}
 \tag{4.81}$$

Für Re ω_0^2 und a^2 lassen sich aufgrund von (4.80) und (4.81) exakte Beziehungen analog zu (4.77) für die Ableitungen nach T an der Stelle $T = 0$ angeben.

Eine weitere Fragestellung, deren Beantwortung mithilfe der Tieftemperaturentwicklung versucht werden sollte, läßt sich folgendermaßen darstellen:

χ^{-1F} besitzt bei einer Temperatur $T_C(p)$ eine Nullstelle $\chi^{-1F}(T_C) = 0$.
 χ^{-1} läßt sich in beiden Phasen schreiben:

$$\chi^{-1F} = 2|p| - a_O^F T + \Phi^F(T, p) \quad (4.82)$$

in der ferrodistorativen Phase und

$$\chi^{-1P} = p + a_O^P T + \Phi^P(T, p) \quad (4.83)$$

in der paradistorativen Phase.

Die Tieftemperaturentwicklung besteht nun gerade darin, die Funktion Φ^F (und entsprechend auch Φ^P) als Potenzreihe in T darzustellen. In der ferrodistorativen Phase hat die Entwicklung von Φ^F nach Potenzen von T einen Konvergenzradius $T_{konv}(p)$.

Für $T \rightarrow T_{konv}$ sollte Φ^F gegen

$$\Phi^F(T_{konv}(p), p) = -2|p| + a_O^F T_{konv}(p) \quad (4.84)$$

konvergieren, d.h. daß

$$T_C(p) = T_{konv}(p) \quad (4.85)$$

gilt.

Aus dem Verhalten von Φ^F an der Konvergenzgrenze läßt sich dann auf das kritische Verhalten, insbesondere auf die Größe des kritischen Exponenten γ schließen. Denn an der Konvergenzgrenze vermuten wir folgendes Verhalten

$$\Phi^F(T, p) - \Phi^F(T_C(p), p) = T - T_C(p) + [T - T_C(p)]^\gamma \quad (4.86)$$

Die Hoffnung war, daß bereits eine Tieftemperaturentwicklung, die in jeder Ordnung von T nur die am stärksten divergenten Terme für $p \rightarrow 0$ berücksichtigt, dieses Verhalten liefert.

Im Anhang ist der Konvergenzradius von Φ^F bestimmt. Es ist

$$T_{konv}(p) = \frac{2\pi^2 v_O |p|}{3r q_D} \quad (4.87)$$

und Φ^F ist für T_{konv} selbst noch konvergent.

Die Nullstelle von $\chi_o^{-1F}(0)$ bestimmen wir aus

$$\chi_o^{-1F}(0) = 2|p| - \frac{3r q_D}{\pi^2 v_O} T - \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{T^n}{|p|^{n-3/2}} = 0 \quad (4.88)$$

Die Koeffizienten a_n sind aus Gleichung (4.79) ablesbar. Die Gleichung $\chi_o^{-1F}(0) = 0$ hat die Lösung

$$T_c = \frac{2 \pi^2 v_0 |p|}{3 \gamma q_D} - \frac{\pi^2 v_0}{3 \gamma q_D} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \frac{T_c^n}{|p|^{n-3/2}} \quad (4.89)$$

Der Wert der Summe ist positiv.

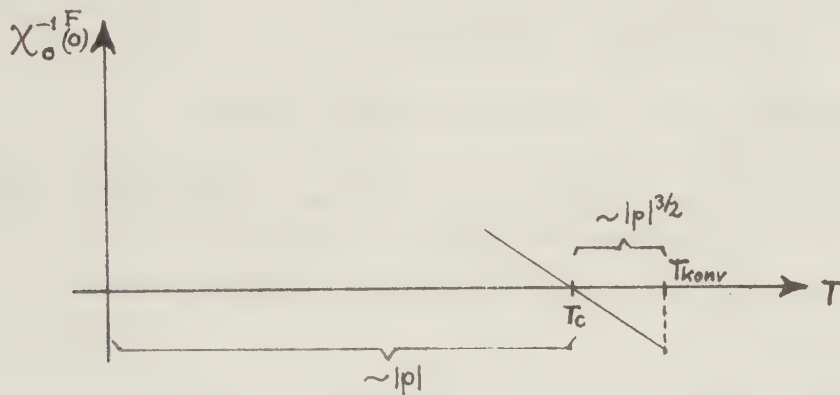
Der erste Term ist gerade T_{konv} . Iteratives Lösen der Gleichung für T_c führt auf

$$T_c = T_{\text{konv}} - O(|p|^{3/2}) \quad (4.90)$$

Als wesentliches Ergebnis haben wir also erhalten, daß bei Beschränkung auf die am stärksten divergenten Terme in der Tieftemperaturentwicklung von $\chi_o^{-1F}(0)$ die Nullstelle von χ_o^{-1F} nicht mit dem Konvergenzradius der Tieftemperaturentwicklung zusammenfällt, sondern im Innern des Konvergenzintervalles liegt.

Die T-Abhängigkeit von $\chi_o^{-1F}(0)$ läßt sich damit wie folgend skizzieren.

Bei $T_c = \frac{2 \pi^2 v_0 |p|}{3 \gamma q_D} - O(|p|^{3/2})$ wird $\chi_o^{-1F}(0)$ gleich Null und nimmt dann zwischen T_c und $T_{\text{konv}} = \frac{2 \pi^2 v_0 |p|}{3 \gamma q_D}$ negative Werte an.



Die Erwartung, mithilfe der angegebenen Tieftemperaturentwicklungen Aussagen über das kritische Verhalten von $\chi_o^{-1}(0)$ machen zu können, läßt sich mit einer Näherung, die nur die führenden Terme in jeder Ordnung von T berücksichtigt, also nicht erfüllen. Folgende Erklärung für das Ergebnis $T_c < T_{\text{konv}}$ scheint recht vernünftig zu sein und

wäre eine weitergehende Untersuchung wert.

Die vollständige Tieftemperaturentwicklung läßt sich schreiben als

$$\chi_o^{-1F}(0) = 2 |p| - \pi^2 T_{\text{konv}}^{-1} |p|^{3/2} \sum_n T^n \left\{ \sum_i f^{(i)}(p) \right\}$$

Die Funktionen $f^{(i)}(p)$ seien durch i in der Ordnung bezüglich p durchnumeriert. In dieser Arbeit wurde dann nur dasjenige $f^{(i)}$ mit dem größten i berücksichtigt. Wir vertauschen formal die Summationen über i und n

$$\Phi^F = \sum_n T^n \left\{ \sum_i f^{(i)}(p) \right\} = \sum_i \left\{ \sum_n T^n f^{(i)}(p) \right\} = \sum_i \Phi^{(i)}$$

und erhalten eine unendliche Summe von Partialsummen $\Phi^{(i)}$, die i.a. verschiedene Konvergenzradien $T_{\text{konv}}^{(i)}$ besitzen werden. Falls es gelingt,

in der Menge der $T_{\text{konv}}^{(i)}$ das Minimum zu finden, wird dies mit dem exakten T_{C}^{ex} übereinstimmen, d.h.

$$\min \left\{ T_{\text{konv}}^{(i)} \right\} = T_{\text{C}}^{\text{ex}}$$

Um diese Untersuchung durchführen zu können, die vielleicht sogar auf das Bestimmen eines Häufungspunktes führt, müßten auch diejenigen Selbstenergieanteile berechnet werden, in denen Phononenfrequenzen über q -Vektoren gekoppelt sind. Diese führen i.a. auf logarithmische Singularitäten. Terme dieser Art ließen sich bereits in zweiter Ordnung in T nicht exakt berechnen. In beliebiger Ordnung dürfte die Berechnung erst recht nicht möglich sein.

Aus den Beziehungen (4.81) zwischen $\chi_o^{\text{IF}}(0)$ und a^2 folgen mit der Tieftemperaturentwicklung (4.70) die klassischen Landau-Resultate an der Stelle T_{C} , die offensichtlich durch Einbeziehen der vernachlässigten Terme korrigiert werden.

4.5 Tieftemperaturentwicklung und Skalenhypothese

Nach der Skalenhypothese ist die inverse statische Suszeptibilität eine generalisierte homogene Funktion von p und T (39). Wir betrachten zunächst die paradistortive Phase.

$\chi_o^{\text{I}}(p, T)$ kann für unseren Kristall geschrieben werden als:

$$\chi_o^{\text{I}}(p, T) = p \, f\left(\frac{T}{p^{1/\varphi}}\right) \quad (4.91)$$

oder

$$\chi_o^{\text{I}}(p, T) = T^{\varphi} \, g\left(\frac{p}{T^{\varphi}}\right) \quad (4.92)$$

Aus (4.91) und (4.92) folgen die beiden Beziehungen

$$\left. \frac{\partial^n \chi_o^{\text{I}}}{\partial p^n} \right|_{p=0} \sim T^{\varphi(1-n)}$$

$$\left. \frac{\partial^n \chi_o^{\text{I}}}{\partial T^n} \right|_{T=0} \sim p^{1-n/\varphi} \quad (4.93)$$

In der ferrodistorativen Phase gilt

$$\left. \frac{\partial^n \chi^{-1}}{\partial T^n} \right|_{T=0} \sim |p|^{1-n/\varphi} \quad (4.94)$$

Wir vergleichen nun (4.93) und (4.94) mit den Entwicklungen von $\chi_o^{-1}(0)$ in den beiden Phasen für den 1-, 2-, 3- und 4-dimensionalen Kristall.

Im eindimensionalen Kristall sind (4.93) und (4.94) mit $\varphi = \frac{3}{2}$ für $n = 0, 1, \dots$ erfüllt. Das heißt, im 1-dimensionalen Kristall ist $\chi_o^{-1}(0)$ in beiden Phasen eine verallgemeinerte homogene Funktion von p und T . Interessant ist hier noch, daß der Konvergenzradius auch für den 1-dimensionalen Kristall endlich ist ($T_{\text{konv}} \sim |p|^{3/2}$ für beide Phasen).

Dies ist ein Widerspruch zu der Tatsache, daß bei endlicher Reichweite der Wechselwirkung der Phasenübergang bei $T_c = 0$ liegt und damit der Konvergenzradius Null sein muß. Wie im ausführlich diskutierten dreidimensionalen Kristall liefert die Tieftemperaturentwicklung bei Beschränkung auf die führenden Terme auch im 1-dimensionalen Fall $T_c < T_{\text{konv}}$. Bei Berücksichtigung aller Terme muß natürlich

$T_c = T_{\text{konv}} = 0$ gelten.

Im 2-dimensionalen Kristall sind mit $\varphi = 1$ (4.93) und (4.94) erfüllt. Auch im 2-dimensionalen Fall ist $\chi_o^{-1}(0)$ in beiden Phasen eine verallgemeinerte homogene Funktion von T und p .

Im 3- und 4-dimensionalen Kristall gilt ($d = 3$ oder 4 als Dimensionskennzeichnung)

$$\chi^{-1p} = 2 |p| - a_o^d T - \sum_{n=1}^{\infty} a_n^d T^n |p|^{-n+d/2}$$

$$\chi^{-1p} = p + c_o^d T + \sum_{n=1}^{\infty} c_n^d T^n p^{-n+d/2}$$

Demnach gilt für die führenden Terme in p $\varphi = 1$, mit von Null verschiedenen Koeffizienten nur für $n = 0$ und 1.

Die unendliche Summe stellt ihrerseits wieder eine verallgemeinerte homogene Funktion dar, aber nicht von der Form (4.91), (4.92)

(sondern $p^{d/2} f(\frac{T}{p})$).

Zusammenfassung

Der klassische Kristall hat für $p = 0$ einen Phasenübergang bei $T = 0$. Aufgrund dieser Kenntnis ist eine Tieftemperaturentwicklung aufgestellt worden. Bezüglich p sind die führenden Terme der Selbstenergie (in Diagrammen dargestellt) in der paradistortiven und in der ferrodistortiven Phase

$$\Pi = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4}$$

oder als Potenzreihe (für $d = 3$)

$$\Pi^{F/P} = a_0^{F/P} T + \sum_{n=1}^{\infty} a_n^{F/P} \frac{T^n}{p^{n-3/2}}$$

Die Imaginärteile der Selbstenergie wurden für $n \geq 2$ in beiden Phasen nur größenordnungsmäßig abgeschätzt. Eine genauere Diskussion von $\text{Im}(\tilde{\chi})$ dürfte allerdings auf erhebliche Schwierigkeiten stoßen.

Für $p \geq 0$ (paradistortive Phase) ist ein Phasenübergang nur für $T = 0$ und $p = 0$ möglich. Denn $\chi_o'(0)$ und $\omega_o'^2$ sind stets größer Null für $T \neq 0$, $p \geq 0$.

In der ferrodistortiven Phase ($p \leq 0$) hat die Tieftemperaturentwicklung von $\chi_o'(0)$ bei Beschränkung auf die führenden Terme eine Nullstelle bei

$$T_c = \frac{2 \pi^2 v_o |p|}{3 \gamma q_D} - O(|p|^{3/2})$$

Der Konvergenzradius der Entwicklung stimmt nicht mit diesem T_c überein, sondern liegt bei dem größeren Wert

$$T_{\text{konv}} = \frac{2 \pi^2 v_o |p|}{3 \gamma q_D}.$$

Diese Diskrepanz zwischen T_c und T_{konv} (bei der Beschränkung auf die führenden Terme) ist die Ursache für das klassische Landau-Verhalten von $\chi_o'(0)$ und a .

$\chi_o'(0)$, ω_o' und a sind in der ferrodistortiven Phase verknüpft über die klassischen Beziehungen

$$\omega_o'^2 = \sqrt{\chi_o'(0)} \sim [(T_c - T) \cdot (1 + O(|p|^{1/2}))]^{1/2} \sim a$$

Im ein- und zweidimensionalen Kristall ist die inverse statische Suszeptibilität $\chi_o^{-1}(p, T)$ eine generalisierte homogene Funktion von p und T .

Der Exponent φ , definiert durch

$$\chi(p, T) = |p|^{-1} f\left(\frac{T}{|p|^{1/\varphi}}\right)$$

hat in beiden Phasen im eindimensionalen Fall den Wert $\varphi = \frac{3}{2}$ und im zweidimensionalen Fall den Wert $\varphi = 1$.

Im drei- und im vierdimensionalen Kristall besteht $\chi_o^{-1}(p, T)$ in den beiden Phasen aus einer homogenen Funktion 1. Ordnung und einer generalisierten homogenen Funktion, deren Summe allerdings keine generalisierte homogene Funktion ist.

In diesem Zusammenhang wäre eine Untersuchung interessant, die ein äußeres Feld F explizit mit einbezieht und überprüft, ob

$\chi(T, F)$ eine generalisierte homogene Funktion von T und F ist.

ANHANG A : Die führenden Selbstenergieanteile

Der n-te Term in der Selbstenergie der ferrodistorativen Phase ist

$$\pi^{(n)} = \left\{ \frac{\hbar}{i\tau} \sum_{q_1} U_{q_1 q_1 - q_1 - q_1}^{(4)} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) \right\}^{n-1} \left\{ \frac{\hbar}{i\tau} \sum_{q_2} U_{q_1 q_2 - q_2 - q_1}^{(4)} \sum_k \left[D_{q_2}^O(\omega_k) \right]^n \right\} \quad (A1)$$

Der führende Beitrag der ersten geschweiften Klammer ist im klassischen Fall nach (4.19) gleich

$$\left\{ \frac{\hbar}{i\tau} \sum_{q_1} U_{q_1 q_1 - q_1 - q_1}^{(4)} \sum_m D_{q_1}^O(\omega_m) \right\}^{n-1} = \left(\frac{3\gamma_{qp}T}{\pi^2 v_o} \right)^{n-1} \quad (A2)$$

Zur Berechnung des führenden Terms in der zweiten Klammer führen wir zunächst die Summation über k mithilfe der Formel (4.3) aus.

$\left[D_{q_2}^O(\omega) \right]^n$ hat zwei n-fache Pole bei $\omega = \omega_q^o$ und bei $\omega = -\omega_q^o$.

Die Residuen dieser beiden Pole sind

$$\text{Res}_{\omega=\omega_q^o} (D^O)^n = \frac{1}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{d\omega^{n-1}} \left[\frac{(-1)^n}{(\omega + \omega_q^o)^n} \right] \Big|_{\omega=\omega_q^o}$$

und

$$\text{Res}_{\omega=-\omega_q^o} (D^O)^n = \frac{1}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}}{d\omega^{n-1}} \left[\frac{1}{(-\omega + \omega_q^o)^n} \right] \Big|_{\omega=-\omega_q^o} \quad (A3)$$

Die Auswertung ergibt

$$\text{Res}_{\omega=\omega_q^o} (D^O)^n = - \frac{(2n-2)!}{[(n-1)!]^2 (2\omega_q^o)^{2n-1}} \quad (A4)$$

$$\text{Res}_{\omega=-\omega_q^o} (D^O)^n = - \text{Res}_{\omega=\omega_q^o} (D^O)^n$$

Setzen wir dieses Ergebnis in (4.3) ein, dann wird die zweite Klammer von (A1) gleich

$$\hbar \frac{(2n-2)!}{[(n-1)!]^2 2^{2n-1}} \sum_{q_2} U_{q_1 q_2 - q_2 - q_1}^{(4)} \frac{1}{\omega_{q_2}^{o 2n-1}} \coth \frac{\hbar \beta \omega_{q_2}}{2} \quad (A5)$$

Im klassischen Fall gilt

$$\frac{\hbar T (2n-2)!}{[(n-1)!]^2 2^{2n-2}} \frac{1}{N} \sum_{q_2} \frac{1}{\omega_{q_2}^{o 2n}} \quad (A6)$$

$$\begin{aligned}
 \frac{6^n}{2\pi^2 v_0^n} \int_0^{q_D} \frac{q^2 dq}{\left(\frac{-12p}{v_0} + q^2\right)^n} &= \frac{6^n}{2\pi^2 v_0^n} \frac{1}{2(n-1)} \int_0^{q_D} \frac{dq}{\left(\frac{-12p}{v_0} + q^2\right)^{n-1}} + \text{const} \\
 &= \frac{6^n (2n-5)!! v_0^{n-2+1/2}}{2\pi^2 v_0^n 2^n (n-1)! (12p)^{n-2+1/2}} \frac{\pi}{2} + O(|p|^{2-n}) \\
 &= \frac{3^{3/2} (2n-5)!!}{v_0^{3/2} \pi (n-1)! 2^{2n-2} |p|^{n-2+1/2}} + O(|p|^{2-n}) \quad (A7)
 \end{aligned}$$

$(2n-5)!!$ bedeutet das Produkt aller ungeraden Zahlen von 1 bis einschließlich $(2n-5)$.

Fassen wir (A2), (A6) und (A7) zusammen, dann erhalten wir für $\tilde{\pi}^{(n)}$ ($n > 2$)

$$\tilde{\pi}^{(n)} = a_n T^n = \frac{3^{n+\frac{1}{2}} (2n-2)! (2n-5)!!}{[(n-1)!]^3 2^{4n-4}} \frac{q_D^{n-1} \delta^n T^n}{\pi^{2n-1} v_0^{n+\frac{1}{2}} |p|^{n-\frac{3}{2}}} \quad (A8)$$

Der Konvergenzradius R der Tieftemperaturentwicklung ist

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_n}{a_{n+1}} \right| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(2n)^2}{(2n-1)(2n-3)} \frac{2\pi^2 v_0}{3\pi q_D} |p| = \frac{2\pi^2 v_0}{3\pi q_D} |p| \quad (A9)$$

Zu beweisen ist noch, daß die Reihe $\sum_{n=3}^{\infty} a_n T^n = \sum_{n=3}^{\infty} b_n |p|^{3/2}$ konvergiert. Es ist

$$b_n = \frac{3^{1/2} \pi (2n-2)! (2n-5)!!}{q_D v_0^{1/2} [(n-1)!]^3 2^{3n-4}} \quad (A10)$$

Wir benutzen das Raabe'sche Konvergenzkriterium (38). Dabei ist zu zeigen, daß für hinreichend große n der Ausdruck

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[n \left(\frac{b_n}{b_{n+1}} - 1 \right) \right] > 1$$

ist.

Es ist

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[n \left(\frac{b_n}{b_{n+1}} - 1 \right) \right] = 2$$

und damit haben wir bewiesen, daß χ_0^{-1} im abgeschlossenen Intervall

$$\left[0, \frac{2\pi^2 v_0 |p|}{3\pi q_D} \right] \text{ gleichmäßig konvergiert.}$$

Anhang B: Cumulantenentwicklung (40)

Die Methode der Cumulantenentwicklung (auch Semi-Invarianten) besteht in der Entwicklung der Zustandssumme Z und der Entwicklung von $\log Z$ nach der Anharmonizität. Bis zum ersten Term lautet die Entwicklung

$$\log Z = \log Z_0 - \beta \langle v_{\text{anh}} \rangle_0 \quad (\text{B.1})$$

Die Mittelwertbildung erfolgt mit der harmonischen Dichtematrix. Aus $\log Z$ und dem Fluktuationsdissipationstheorem können wir im klassischen Grenzfall die statische Suszeptibilität $\chi^{(0)}$ angeben.

$$\text{Aus } \chi_{q=0}^{(0)} = \beta \langle x_0^2 \rangle \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial V_0} \log Z = - \frac{\beta}{2} \langle x_0^2 \rangle$$

folgt

$$\chi_0^{(0)} = -2 \frac{\partial}{\partial V_0} \log Z \quad (\text{B.2})$$

oder mit Gleichung (3.1)

$$\chi_0^{(0)} = -2 \frac{\partial}{\partial V_0} [\log Z_0 - \beta \langle v_{\text{anh}} \rangle_0] \quad (\text{B.3})$$

Um die Integration über den Phasenraum möglichst einfach durchführen zu können, diagonalisieren wir die harmonische Hamiltonfunktion durch eine orthogonale Transformation, die eine Verallgemeinerung der von Berlin und Kac (41) angegebenen Transformation darstellt. Die Transformationsmatrix A , die die quadratische Form

$$H = \frac{1}{2} \sum_i (\dot{x}_i^2 + \omega_0^2 x_i^2) - \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} x_i x_j \quad \text{in die Diagonalform} \quad (\text{B.4})$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_i [\dot{y}_i^2 + \omega_i^2 y_i^2]$$

bringt, kann mit der folgenden $N \times N$ - Matrix

$$A = (A_\mu) = \left(\frac{1}{\sqrt{N}} [\cos \vec{q}_\mu \cdot \vec{R}_\ell + \sin \vec{q}_\mu \cdot \vec{R}_\ell] \right) \quad (\text{B.5})$$

angegeben werden. $\vec{R}_\ell$ ist ein Gittervektor im direkten Gitter und $\vec{q}_\mu$ ein Vektor aus der 1. Brillouinzone.

Unter der Transformation A geht der anharmonische Anteil der Hamiltonfunktion $V_{\text{anh}} = \frac{\gamma}{4!} \sum_i x_i^4$ in den Ausdruck

$$V_{\text{anh}} = \frac{\gamma}{4!} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3, \vec{q}_4} \Delta(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3, \vec{q}_4, K) y_{\vec{q}_1} y_{\vec{q}_2} y_{\vec{q}_3} y_{\vec{q}_4} \quad \text{über.} \quad (8.6)$$

Die Funktion $\Delta(q_1 q_2 q_3 q_4, K)$ hat die Gestalt

$$\begin{aligned} \Delta(q_1 q_2 q_3 q_4, K) = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{K}} \{ & -\delta_{q_1+q_2+q_3+q_4; K} + \delta_{-q_1-q_2+q_3+q_4; K} \\ & + \delta_{q_1-q_2-q_3+q_4; K} + \delta_{-q_1-q_2-q_3+q_4; K} \} \end{aligned} \quad (8.7)$$

K ist ein reziproker Gittervektor.

Die kollektiven Koordinaten y_q sind reellwertig. Deshalb sind die Integrationen des Zustandsintegrals leicht ausführbar.

Für die harmonische Zustandssumme erhalten wir

$$\log Z_0 = \log \left[\left(\prod_q \int_{-\infty}^{\infty} dy_q e^{-\frac{\beta}{2} \dot{y}_q^2} \right) \left(\prod_q \int_{-\infty}^{\infty} dy_q e^{-\frac{\beta}{2} \omega_q^2 y_q^2} \right) \right] = \log \left[\left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_q \frac{1}{\omega_q} \right] \quad (8.8)$$

Um den Term $-\beta \langle v_{\text{anh}} \rangle_0$ zu erhalten, müssen wir den folgenden Ausdruck auswerten:

$$-\beta \langle v_{\text{anh}} \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \frac{\gamma}{4!} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}^N \prod_q \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta}{2} \omega_q^2 y_q^2} \quad (8.9)$$

$$\left[\sum_{q_1 q_2 q_3 q_4, K} \Delta(q_1 q_2 q_3 q_4, K) y_{q_1} y_{q_2} y_{q_3} y_{q_4} \right] dy_q$$

Ausführen der Integrationen:

$$\begin{aligned} -\beta \langle v_{\text{anh}} \rangle_0 = & -\frac{\gamma}{Z_0 4!} \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_q \frac{1}{\omega_q} \sum_{q_1 q_2 q_3 q_4, K} \Delta(q_1 q_2 q_3 q_4, K) \times \\ & \left[\frac{3}{\beta^2 \omega_{q_1}^2} \delta_{q_1 q_2} \delta_{q_1 q_3} \delta_{q_1 q_4} + \frac{1}{\beta \omega_{q_1}^2} \frac{1}{\beta \omega_{q_3}^2} \right. \\ & \delta_{q_1 q_2} \delta_{q_3 q_4} (1 - \delta_{q_1 q_3}) + \frac{1}{\beta \omega_{q_1}^2} \frac{1}{\beta \omega_{q_2}^2} \delta_{q_1 q_3} \delta_{q_2 q_4} \\ & \left. (1 - \delta_{q_1 q_2}) + \frac{1}{\beta \omega_{q_1}^2} \frac{1}{\beta \omega_{q_2}^2} \delta_{q_1 q_4} \delta_{q_2 q_3} (1 - \delta_{q_1 q_2}) \right] \end{aligned} \quad (8.10)$$

Dieser Ausdruck vereinfacht sich, wenn wir unter Berücksichtigung der Definition von $\Delta(q_1, q_2, q_3, q_4, K)$ die Summation über K ausführen und nur solche Summen berücksichtigen, deren Summandenzahl mindestens von der Ordnung N ist. Dann ist

$$\begin{aligned} -\beta \langle v_{\text{anh}} \rangle_0 &= -\frac{1}{z_0} \frac{\beta^4}{4!} \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_q \frac{1}{\omega_q^0} \sum_{q_1+q_2} \frac{3}{\beta^2 N} \frac{1}{\omega_{q_1}^0} \frac{1}{\omega_{q_2}^0} \\ &= -\frac{3\beta^4}{4!N} \sum_{q_1+q_2} \frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Wir setzen die Gleichungen (B.8) und (B.11) in die Gleichung (B.3) ein und erhalten

$$\begin{aligned} X_0(0) &= -2 \frac{\partial}{\partial v_0} \left[\log \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_q \frac{1}{\omega_q^0} \right] - \frac{3\beta^4}{\beta 4! N} \sum_{q_1+q_2} \frac{1}{\omega_{q_1}^0 \omega_{q_2}^0} \\ &= -2 \left[-\frac{1}{2\omega_0^0} + \frac{3\beta^4}{\beta 4! \omega_0^0} \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{\omega_q^0} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Für $\beta \omega_0^0 \gg 1$ können wir auch schreiben

$$X_0(0) = \frac{1}{\omega_0^0 + \frac{\beta^4}{2\beta N} \sum_q \frac{1}{\omega_q^0}} \quad (\text{B.13})$$

Literaturverzeichnis

- (1) A. F. Devonshire, Phil. Mag. 40, 1040 (1949)
- (2) L. D. Landau, Sov. Phys. 11, 545 (1937)
- (3) L. D. Landau, E. M. Lifschitz, Lehrbuch der Theoretischen Physik V, Kap. 14, Berlin 1971
- (4) W. J. Merz, Phys. Rev. 75, 687 (1949)
- (5) W. Cochran, Adv. Phys. 9, 387 (1960)
- (6) W. Cochran, Adv. Phys. 10, 401 (1961)
- (7) J.C. Slater, J. Chem. Phys., 9, 16 (1941)
- (8) G.E. Bacon, R.S. Pease, Proc. Roy. Soc. A 230, 359 (1955)
- (9) R. Blinc, J. Phys. Chem. Sol. 13, 204 (1959)
- (10) P.G. De Gennes, Sol. State Comm. 1, 132 (1963)
- (11) R. Brout, K.A. Müller, H. Thomas, Sol. State Comm. 4, 507 (1966)
- (12) M. Tokunaga, T. Matsubara, Progr. Theor. Phys. 35, 581 (1966)
- (13) M. Tokunaga, Progr. Theor. Phys. 36, 857 (1966)
- (14) J. Villain, S. Stamenković, Phys. Stat. Sol. 15, 585 (1966)
- (15) K.K. Kobayashi, J. Phys. Soc. Jap. 24, 497 (1968)
- (16) P.A. Fleury, J.F. Scott, J.M. Worlock, Phys. Rev. Letters 21, 16 (1968)
- (17) G. Shirane, Y. Yamada, Phys. Rev. 177, 858 (1969)
- (18) K.A. Müller, W. Berlinger, F. Waldner, Phys. Rev. Letters 21, 814 (1968)
- (19) H. Thomas, K.A. Müller, Phys. Rev. Letters 21, 1256 (1968)
- (20) E. Pytte, J. Feder, Phys. Rev. 187, 1077 (1969)
- (21) H. Thomas, in Structural Phase Transitions and Soft Modes (Herausgeber: E.J. Samuelsen, E. Andersen, J. Feder), Oslo 1971
- (22) E. Pytte, Phys. Rev. Letters 28, 895 (1972)
- (23) N.S. Gillis, T.R. Koehler, Phys. Rev. Letters 29, 369 (1972)
- (24) N.S. Gillis, T.R. Koehler, Phys. Rev. B 9, 3806 (1974)
- (25) E. Eisenriegler, Phys. Rev. B 9, 1029 (1974)
- (26) A. I. Sokolov, Sov. Phys. Sol. State 16, 478 (1974)
- (27) L. P. Kadanoff in Proc. Intern. School of Physics "Enrico Fermi", Herausgeber M. Green, New York 1971
- (28) Shang-keng Ma, Rev. Mod. Phys. 45, 589 (1973)
- (29) K.G. Wilson, J. Kogut, Phys. Rep. 126, 77 (1974)
- (30) S. A. Cowley, A. D. Bruce, J. Phys. C: Sol. State Phys. 6, L191 (1973)
- (31) B. Jouvét, A. Holz, J. Phys. C: Sol. State Phys. 7, 1449 (1974)

- (32) P.C. Kwok, P.B. Miller, Phys. Rev. 151, 387 (1966)
- (33) z.B. D. N. Zubarev, Fortschr. Phys. 9, 275 (1961)
- (34) T. Matsubara, Progr. Theor. Phys. 14, 351 (1955)
- (35) A.A. Abrikosow, L.P. Gorkov, I.E. Dzyaloshinski,
"Methods of Quantum Field Theory in Statistical
Physics", Pergamon Press, Oxford, 1965
- (36) V.L. Bonch-Bruевич, S.V. Tyablikov, "The Green's Function
Method in Statistical Mechanics", North
Holland Publ. Amsterdam, 1962
- (37) S. Großmann, Funktionalanalysis II, Frankfurt am Main, 1970
- (38) G.M. Fichtenholz, Differential- und Integralrechnung II,
Kap. XI Berlin, 1964
- (39) H.E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical
Phenomena, Kap. 11, Oxford, 1971
- (40) A. Isihara, Statistical Physics, Kap. 5.5, New York/London, 1971
- (41) T.H. Berlin, M. Kac, Phys. Rev. 86, 821 (1952)

Abschließend möchte ich Herrn Prof. Dr. H. Thomas herzlichen Dank sagen für die Anregung zu der Bearbeitung dieses interessanten Themas, weiterhin für die vielen anregenden Diskussionen und Hinweise, die für den Fortgang der Arbeit sehr wichtig waren.

Herrn Dipl.-Physiker P. Engelhardt danke ich sehr für die vielen anregenden Diskussionen, besonders für die kontinuierliche Überprüfung der Rechnungen, die Kontrolle des Manuskriptes und die Anfertigung der Abbildungen.

Für die numerischen Rechnungen wurde die Rechenanlage UNIVAC 1108 der Frankfurter Universität benutzt, wofür ich dem Zentralen Recheninstitut danken möchte.

Lebenslauf

5. 7. 1944	geboren in Frankfurt (Oder) als Sohn des Reichsbahninspektors Hans Wiesner und seiner Ehefrau Hedwig Wiesner, geb. Siewert.
Sept. 1951 bis Juli 1959	Besuch der Grundschule in Frankfurt (Oder)
Sept. 1959 bis Juli 1963	Besuch der Erweiterten Oberschule in Frankfurt (Oder), abgeschlossen mit der Reifeprüfung
Sept. 1963 bis Aug. 1964	Lehre als Betonbauer in Frankfurt (Oder), abgeschlossen mit dem Facharbeiterbrief
Okt. 1964	Immatrikulation an der Universität Leipzig mit dem Studienziel Diplom-Physiker
April 1965	Flucht in die Bundesrepublik
April 1965 bis Sept. 1965	Kurs zur Anerkennung des Reifezeugnisses in Fulda
WS 1965/66	Immatrikulation als Physikstudent an der Universität Marburg
Febr. 1968	Vordiplomprüfung
Sept. 1969	Mündlicher Teil der Diplom-Hauptprüfung an der Universität Marburg
19.9.1969	Eheschließung mit der Buchhändlerin Helga Graf
Okt. 1969 bis Mai 1970	Diplom-Arbeit, angefertigt unter Betreuung von Herrn Prof. Dr. P. Fulde und Herrn Prof. Dr. U. Gerhardt an der Universität Frankfurt am Main
1.10.1970	Wissenschaftlicher Mitarbeiter von Herrn Prof. Dr. H. Thomas
seit 1. 8.1971	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Didaktik der Physik

Meine akademischen Lehrer waren:

Avakumović, Bock, Dimroth, Dinges, Doebner, Fulde, Gerhardt, Graweit, Greiner, Großmann, Jelitto, Körner, Köthe, Ludwig, Madelung, Münster, Petzold, Peyerimhoff, Stuke, Thomas, Walcher, Wolter

